

PUSLAIDININKIŲ FIZIKOS INSTITUTAS  
VILNIAUS UNIVERSITETAS

**Aurimas Čerškus**

**BERILIO IR SILICIO PRIEMAIŠŲ ĮTAKA  
GaAs/AlAs KVANTINIŲ ŠULINIŲ  
SPINDULIUOTEI**

Daktaro disertacija

Fiziniai mokslai, fizika (02P), puslaidininkų fizika (P265)

Vilnius, 2009

Disertacija rengta 2005-2009 metais Puslaidininkių fizikos institute.

Mokslinis vadovas:

Prof. habil. dr. Algis Jurgis Kundrotas (Puslaidininkių fizikos institutas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P, puslaidininkių fizika – P 265)

## Padėka

Dėkoju Puslaidininkų fizikos instituto Nevienalyčių struktūrų laboratorijai, leidusiai pasinaudoti jų turima unikalia mokslinė aparatūra ir suteikusiai galimybę man paruošti šį darbą. Ypatingai dėkingas darbo vadovui prof. habil. dr. Algiui Jurgiui Kundrotui už mokslines diskusijas, už visapusišką pagalbą atliekant eksperimentus ir interpretuojant gautus rezultatus, už vertingus patarimus, idėjas ir pasiūlytus iškilusių mokslinių klausimų sprendimo kelius.

Esu dėkingas Jungtinės Karalystės Manchester ir Sheffield universitetų elektronikos ir elektrotechnikos skyriams už pagal jų bendrą projektą užaugintus bandinius, Puslaidininkų fizikos instituto Terahercų elektronikos laboratorijai ir Jungtinės Karalystės Leeds universiteto elektronikos ir elektrotechnikos skyriui už pagal jų bendrą projektą užaugintus bandinius. Taip pat dėkoju dr. Gintarui Valušiui už bendrus projektus, už kai kurių bandinių dizainą bei tarpininkavimą gaminant ir gaunant bandinius. Noriu padėkoti Gyčiui Juliui ir Angelei Danutei Steikūnams už bandinių ėsdinimą.

Šį darbą rėmė:

- Puslaidininkų fizikos institutas,
- Lietuvos valstybinis mokslo ir studijų fondas.

Šis darbas buvo sudėtinė dalis tarptautinių projektų:

1. NATO Science for Peace „Broad band detectors” SfP project 978030. Development of Very-Broad Frequency Band Detectors of Electromagnetic Radiation. 2002–2006. PFI: vadovas S. Ašmontas, University of Frankfurt: vad. H.G. Roskos; University of Thessaloniki: vad. A.N. Anagnostopoulos). Projekto vertė 245 000 EUR.
2. NATO collaborative-linkage grant PST.CLG.979121 „Semiconductor nanostructures for microwave to T-wave technology”. 2002-2004. Vadovai: dr. P. Harrison (Leeds, J. K.), dr. G. Valušis (Vilnius, Lietuva). Projekto vertė 10 000 EUR.

3. EU network of Centers of Excellence (PRAMA) 2003–2005: The Center in Processing, Research and Application of Advanced Materials (PRAMA) – responsibilities in co-operation in research of quantum structures and terahertz technologies.
4. European Office of Aerospace Research and Development – contract No. FA8655-06-1-3007 Compact Solid State Terahertz Detectors (2006). University of Leeds (U.K.) – Semiconductor Physics Institute, Vilnius – University of Manchester (U.K.) cooperation: Project's principal investigator – Prof. P. Harrison (Leeds). Coordinator at Manchester – Dr. M. Halsall. Coordinator at Vilnius – Dr. G. Valušis. Projekto vertė – 49 918 USD.

ir dalis Lietuvos valstybinio mokslo ir studijų fondo nacionalinių projektų:

5. Sutarties Nr. V-04004. Parama tarptautiniam projektui pagal NATO Mokslo programą: Mokslo ryšių ir technologijos sub-programa „Puslaidininkiniai nanodariniai mikrobangų bei T-bangų technologijoms“. 2002–2004 m. Vadovas dr. G. Valušis. Projekto vertė 15 000 litų.
6. Sutarties Nr. B-03005. Naujų elektroninių prietaisų kūrimas milimetriniam bangų diapazonui. 2003–2006 m. Vadovas habil. dr. Ž. Kancleris. Projekto vertė 791 120 litų.
7. Sutarties Nr. C-07004. Nanostruktūriniai terahercinės fotonikos komponentai. 2007–2009 m. Vadovas dr. G. Valušis. Projekto vertė 1 100 000 litų.
8. Sutarties Nr. P-07001. Nanodariniai mikrobangų ir terahercų elektronikai. 2007–2009 m. Vadovas prof. habil. dr. S. Ašmontas. Projekto vertė 1 050 000 litų.

# TURINYS

Santrumpos.....	6
ĮVADAS.....	7
Darbo tikslas.....	8
Darbo uždaviniai.....	8
Mokslinis naujumas.....	9
Ginami teiginiai.....	9
Rezultatų aprobavimas ir publikavimas.....	10
Disertacijos sandara.....	10
1 LITERATŪROS APŽVALGA.....	11
1.1 Puslaidininkinės medžiagos kvantiniams dariniams.....	11
1.2 GaAs ir Al(Ga)As tūrinių kristalų savybės.....	15
1.3 Dvimačių kvantinių darinių tipai.....	17
1.4 GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As kvantiniai šuliniai.....	19
1.4.1 Juostų trūkiai GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As kvantiniuose šuliniuose.....	24
1.4.2 GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As kvantinių šulinių optinės savybės.....	25
1.4.3 Eksitonai kvantiniuose šuliniuose.....	28
1.4.4 Priemaišos GaAs/Al(Ga)As kvantiniuose šuliniuose.....	32
1.4.5 Priemaišų simetrija ir spektras.....	34
2 BANDINIAI IR MATAVIMO TECHNIKA.....	39
2.1 Bandiniai.....	39
2.2 Nuostoviosios fotoluminescencijos tyrimo schema.....	41
3 SILPNAI δ LEGIRUOTŲ GaAs/AlAs KVANTINIŲ ŠULINIŲ FOTOLIUMINESCENCIJOS SPEKTRŲ TYRIMAS.....	44
3.1 Eksperimentiniai fotoluminescencijos spektrų rezultatai.....	44
3.2 Savitoji spinduliuotė.....	51
3.2.1 Savitosios spinduliuotės fotoluminescencijos spektro linijų pavidalas.....	51
3.2.2 Priemaišų įtaka savitosios spinduliuotės spektrams.....	57
3.3 Priemaišinė spinduliuotė.....	60
3.3.1 Eksperimentiniai rezultatai.....	60
3.3.2 Priemaišinės spinduliuotės spektro asimetrija.....	62
3.4 Trečiojo skyriaus išvados.....	69
4 SPINDULIUOTĖS TĄŠA GaAs/AlAs KVANTINIŲ ŠULINIŲ SPEKTRUOSE.....	71
4.1 Fononinės replikos Be δ-legiruotuose GaAs/AlAs kvantiniuose šuliniuose.....	71
4.2 Be δ-legiruotų GaAs/AlAs kvantinių šulinių Huang-Rhys faktorius.....	77
4.3 Donorinė Si priemaiša legiruotų bandinių fotoluminescencijos juosta.....	82
4.4 Ketvirtojo skyriaus išvados.....	86
5 KVANTINIŲ ŠULINIŲ SPINDULIUOTĖ ARTI MOTT VIRSMO.....	88
5.1 Eksperimentinis priemaišų tankio įtakos FL spektrams tyrimas.....	88
5.2 Mott virsmas 2D sistemose.....	91
5.3 Penktojo skyriaus išvados.....	99
IŠVADOS.....	100
LITERATŪROS SĄRAŠAS.....	102
AUTORIAUS MOKSLO PUBLIKACIJOS DISERTACIJOS TEMA.....	112

## Santrumpos

FL – fotoluminescencija

QW – kvantinis šulinys {*angl.* quantum well}

MPE – molekulių pluoštelių epitaksija

TDE – trupmeninės dimensijos erdvė

LO – išilginis optinis fononas {*angl.* longitudinal optical}

LVM – lokaliųjų virpesių moda

## IVADAS

Šiuolaikinių technologijų metodais yra išauginami puslaidininkiniai nanometrinių darinių. Parenkant atitinkamas puslaidininkines medžiagas su skirtingais draudžiamųjų energijų tarpais yra sukuriami krūvininkams potencialiniai barjerai. Krūvininkų judėjimas gali būti apribotas viena, dviem ar visomis trimis kryptimis. Atitinkamai dariniai skirstomi į dvimačius, kurie vadinami kvantiniais šuliniais, vienmačius, kurie vadinami kvantinėmis vielomis, ir nulinio mato, kurie vadinami kvantiniais taškais. Disertacijoje bus nagrinėjamos kvantinių šulinių, sudarytų iš galio arsenido (GaAs) ir aliuminio arsenido (AlAs) puslaidininkinių sandūrų, fizikinės savybės. Jie skiriasi nuo GaAs ir  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  darinių tuo, kad pasiekiamas maksimalus barjero aukštis ir maksimalus atstumas tarp kvantinių lygmenų šuliniuose.

Iš kvantinės mechanikos žinome, kad potencialo duobėje elektrono energijos spektras tampa diskrečiuoju ir jis priklauso nuo duobės gylio ir pločio. Sudarius kristale potencialinį barjerą, galima tirti kvantinės dalelės tuneliavimą pro tokį barjerą. Visa tai atvėrė plačias naujos kietojo kūno fizikos tyrimo perspektyvas bei kietojo kūno kvantinių prietaisų panaudojimo galimybes. Šiuo metu kvantinių šulinių ir jų sistemos – supergardelių tyrimas bei jų taikymas yra viena iš labiausiai besivystančių kietojo kūno fizikos sričių.

Priemaišomis legiruoti kvantiniai šuliniai išsiskiria iš tūrinių kristalų savo ypatybėmis. Tūriniuose kristaluose priemaišų jonizacijos energijos bei energiniai lygmenų spektrai yra tik griežtai apibrėžti. Tuo tarpu, keičiant kvantinių šulinių matmenis, galima pakeisti ne tik šulinio lygmenų energinį spektrą, bet ir priemaišų jonizacijos energiją. Tai atveria žymiai platesnes perspektyvas kuriant įvairius optoelektroninius prietaisus. Pasinaudojus kvantinių šulinių fundamentinėmis savybėmis, pakeitus kvantinių šulinių geometrinius matmenis, galima gauti įvairios energijos krūvininkų optinius šuolius. Ši savybė plačiai taikoma gaminant įvairaus bangos ilgio spinduliuotės įrenginius, pavyzdžiui, lazerius ar šviesai jautrius jutiklius. Priešingai negu

tūriniuose kristaluose, kvantiniuose šuliniuose galimi elektronų šuoliai toje pačioje juostoje tarp pojuosčių. Šiuo principu pagrįstas kvantinių šulinių infraraudonųjų spindulių jutiklių ir kvantinių kaskadinių lazerių veikimas.

Šiuo metu intensyviai įsisavinami ir tobulinami infraraudonųjų spindulių ir terahercų srities emiteriai ir jutikliai. Šiai sričiai reikalingi plačiajuosčiai ar technologiškai keičiamų parametrų prietaisai. Optinių šulių požiūriu, į šią sritį patenka krūvininkų šuoliai į priemaišas (iš priemaišų). Kaip tik kvantiniai šuliniai su įterptomis priemaišomis atveria plačias perspektyvas tokiems prietaisams kurti. Iki šiol buvo sukurti skirtingo tipo kvantinių šulinių infraraudonųjų spindulių jutikliai. Tam labiausiai buvo išvystyta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As iki sudėties  $x = 0,4$  kvantinių šulinių technologija. Mes praplėsime žinias apie GaAs/AlAs kvantinius šulinius bei galimybes taikyti kuriant tokius prietaisus.

Šis darbas skirtas grynujų ir berilio (Be) akceptorinėmis bei silicio (Si) donorinėmis priemaišomis legiruotų GaAs/AlAs kvantinių šulinių fotoluminescencijos (FL) savybių tyrimui.

Gautais rezultatais tikimės prisidėti prie prietaisų, kuriems svarbios priemaišų savybės kvantiniuose šuliniuose, kūrimo ir tobulinimo, bei geresnio procesų, vykstančių priemaišomis legiruotuose kvantiniuose šuliniuose, supratimo.

### ***Darbo tikslas***

Ištirti berilio akceptorinių priemaišų ir silicio donorinių priemaišų įtaką GaAs/AlAs kartotinių kvantinių šulinių fotoluminescencijos spektrams nuo skystojo helio iki kambario temperatūros. Nustatyti priemaišų tipo ir tankio įtaką skirtingo pločio GaAs/AlAs kvantinių šulinių spinduliuotei.

### ***Darbo uždaviniai***

1. Nustatyti priemaišų įtaką savitajai spinduliuotės sričiai. Teoriškai aprašyti eksitoninę spinduliuotę esant įvairiems kvantinių šulinių pločiams. Palyginti eksperimentinius rezultatus su teoriniais skaičiavimais.



2. Ištirti priemaišinę spinduliuotę GaAs/AlAs kartotiniuose kvantiniuose šuliniuose. Išsiaiškinti priemaišinės spinduliuotės linijos pavidalo priklausomybę nuo kvantinio šulinio pločio ir ją aprašyti teoriškai.

3. Eksperimentiškai ištirti fononų įtaką priemaišinei spinduliuotei GaAs/AlAs kvantiniuose šuliniuose. Išsiaiškinti fononinių replikų prigimtį bei jų ryšį su Huang-Rhys faktoriumi. Nustatyti Huang-Rhys faktoriaus dydį Be  $\delta$ -legiruotuose GaAs/AlAs kartotiniuose kvantiniuose šuliniuose ir palyginti jo vertes su teorinių skaičiavimų rezultatais.

4. Ištirti stipriai priemaišomis  $\delta$ -legiruotų GaAs/AlAs kvantinių šulinių fotoluminescencijos spektrų ypatumus. Išsiaiškinti dielektrikas-metalas Mott virsmo sąlygas ir pasekmes kvantiniuose šuliniuose.

### ***Mokslinis naujumas***

Eksperimentinių darbų apie GaAs/AlAs kvantinių šulinių optines savybes nėra daug. Disertacijoje gauti rezultatai ne tik papildo iki šiol mokslinėje literatūroje aprašytus rezultatus apie GaAs/AlAs kvantinių šulinių optines savybes, bet ir suteikia naujų žinių apie priemaišų įtaką šioms savybėms. Taip pat pateikiami visiškai nauji rezultatai apie priemaišinės spinduliuotės sąveiką su gardelės svyravimais, kurie sukuria fononines replikas.

Šioje disertacijoje teoriškai įrodyta priemaišinės spinduliuotės linijos asimetrija, naudojantis trupmeninės dimensijos erdvės modeliu. Taip pat naudojantis šiuo modeliu, teoriškai apskaičiuota Huang-Rhys faktoriaus priklausomybė nuo kvantinio šulinio pločio. Gauta Huang-Rhys faktoriaus išraiška dvimačiu atveju.

Pateikiami eksperimentiniai rezultatai apie Mott virsmą  $p$  tipo kvantiniuose šuliniuose.

### ***Ginami teiginiai***

1. Priemaišos ne tik įtakoja savitąją eksitoninę spinduliuotę, bet ir sukuria savąjį asimetrinį priemaišinės rekombinacijos spektrą.

2. Priemaišinės spinduliuotės sąveika su išilginiais optiniais fononais sukuria fononines replikas, kurių intensyvumą nusako Huang-Rhys faktorius. Huang-Rhys faktorius siaurėjant GaAs/AlAs kvantiniams šuliniams didėja.

3. Dvimačiams dariniams reikia didesnio priemaišų tankio, kad įvyktų dielektrikas-metalas Mott virsmas. Nauja pojuosčių sandara formuojasi kvantiniuose šuliniuose virš Mott virsmo.

### ***Rezultatų apibavimas ir publikavimas***

Disertacijos tema padaryta vienuolika stendinių pranešimų: trys respublikinėje „Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija“ (2005, 2009) ir aštuoni tarptautinėse konferencijose „International symposium on ultrafast phenomena in semiconductors“ (2004, 2007), „Advanced optical materials and devices“ (2005), „Modulated Semiconductor Structures“ (2007) ir „Radiation interaction with material and its use in technologies“ (2008). Iš jų šeši pranešimai įtraukti į disertaciją.

Disertacijos tema paskelbta trylika straipsnių, iš jų aštuoni įtraukti į disertaciją. Vienuolika mokslinių straipsnių išspausdinta leidiniuose įtrauktuose į Mokslinės informacijos instituto (ISI) duomenų bazes. Du straipsniai paskelbti Lietuvos mokslo tarybos patvirtinto sąrašo tarptautinėse duomenų bazėse referuojamame leidinyje.

### ***Disertacijos sandara***

Disertaciją sudaro įvadas, literatūros apžvalga, darbo metodikos ir darbo rezultatų aprašymas. Darbo rezultatai aptarti trijuose skyriuose, kurių pabaigoje pateiktos atskiros išvados. Disertacijos pabaigoje suformuluotos 7 bendrosios išvados, pateiktas cituotos literatūros sąrašas (166 šaltiniai) ir autoriaus darbų sąrašas disertacijos tema.

Pagrindinė medžiaga pateikta 114 puslapių, kartu su 7 lentelėmis ir 43 paveikslais.

# 1 LITERATŪROS APŽVALGA

## *1.1 Puslaidininkinės medžiagos kvantiniams dariniams*

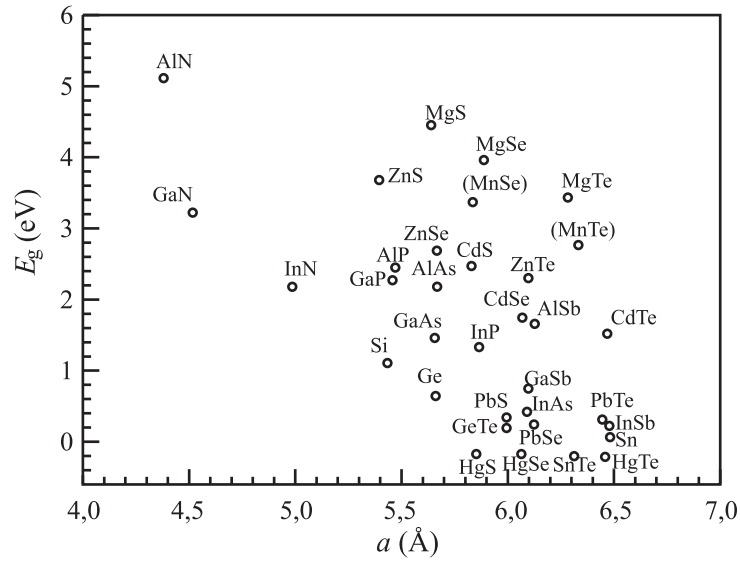
Nuo XX amžiaus pradžios labai domimasi įvairiomis puslaidininkinėmis medžiagomis. Buvo siekiama išauginti kuo tobulesnę vienalytę kristalinę medžiagą. Dabar, pasinaudojus naujausiomis technologijomis, galima išauginti darinį iš kelių skirtingo tipo medžiagų, kurios sudarytų sudėtingą sandarą, ar būtų labai mažų geometrinių išmatavimų. Šiandien darinių matmenis galime kontroliuoti nanometrinėje skalėje. Tokiems dariniams nebegalioja gerai žinomi klasikinės fizikos dėsniai ir juos keičia kvantinės mechanikos principai. Geriausiai žinomas pavyzdys yra kvantinis šulinys. Jis sudarytas iš labai plono sluoksnio puslaidininkinės medžiagos įterptos į kitą, didesnio draudžiamosios energijos tarpo, medžiagą. Dėl potencialinio ribojimo, elektronai (skylės) yra uždaromi šiame sluoksnyje ir gali laisvai judėti tik jo plokštumoje, sudarydami dvimates (2D) elektronų (skylių) dujas. Suformavus pasikartojančių kvantinių šulinių sistemą turime kartotinių kvantinių šulinių darinį. Jei krūvininkai gali tuneliuoti iš vieno kvantinio šulinio į kitą, tai tokį darinį vadiname supergardoje. Krūvininkų judėjimą galima riboti ir likusiomis kryptimis. Kai krūvininkų judėjimas ribojamas dvejomis kryptimis turime vadinamąsias kvantines vielas. Visomis trimis kryptimis apribojus krūvininkų judėjimą, suformuojame kvantinį tašką, kurio energijos spektras yra diskretinis kaip ir atomų.

Kvantinių darinių (kvantinių šulinių ir supergardelių) užuomazga galima laikyti 1970 metus, kai Leo Esaki ir Raphael Tsu darbe [1] numatė, kad, keičiant plonų sluoksnių sudėtį ar juose įterpiamų priemaišų tankį, galima sukurti vienmatį periodinį potencialą, tuo pačiu naują supergardoje, kurioje turi atsirasti naujos ir neįprastos kietajam kūnui savybės. Kvantinėje mechanikoje yra gerai žinomas dimensinis kvantavimas, kurio dėka susidaro siauros leidžiamosios ir draudžiamosios energijos minijuostos, sukuriama neigiama diferencialinė varža ar Bloch osciliacijos. Vėliau dvimačiuose dariniuose buvo

stebėti neįprasti sveikųjų skaičių kvantinis [2] ir trupmeninis kvantinis [3] Hall reiškiniai.

Tuo metu plačiai taikytos skystosios fazės epitaksijos būdu užaugintų sandūrų perėjimas nuo vieno sluoksnio į kitą užimdavo 10 nm ir daugiau storį. Norint auginti labai plonus sluoksnius, reikėjo technologijos su valdomu monoatominio sluoksnių nusodinimu, kad sandūra gautųsi kuo staigesnė. Taip pat reikėjo išmokti keisti sluoksnio sudėtį, legiruojančiųjų priemaišų rūšį bei jų tankį. Alfred Y. Cho pasiūlė molekulių pluoštelių epitaksijos (MPE) technologiją [4], suvaidinusią lemiamą vaidmenį, kuriant naujus nanometrinius darinius. 1971 metais jis išaugino pirmąsias aukštos kokybės GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As supergardes [5]. 1974 metais buvo atlikti dimensinį kvantavimą įrodantys pirmieji eksperimentai su MPE būdu išaugintais GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantiniais šuliniais [6, 7, 8]. Taip pat buvo vystomos ir kitokios technologijos. Iš cheminio garų nusodinimo technologijos buvo išvystyta metaloorganinė dujų epitaksija, kurią pirmasis aprašė dar 1968 metais Harold M. Manasevit [9]. Dėl savo paprastumo metaloorganinė dujų epitaksija plačiai taikoma pramonėje. Be minėtųjų yra ir kitų technologinių sprendimų: cheminė spindulio epitaksija {Chemical Beam Epitaxy}, kurią pirmasis parodė Won-Tien Tsang 1984 metais [10], karštos sienos epitaksija {hot wall epitaxy} [11], atominio sluoksnio epitaksija {atomic layer epitaxy} [12].

Idealiems kvantiniams dariniams auginti, reikia parinkti tokią puslaidininkių porą, kad nesusidarytų struktūriniai defektai sandūrose. Šių porų turi būtų panašios kristalinės gardelės bei labai artimos jų gardelės pastoviosios. Yra keletas dvigubųjų junginių, kurie turi skirtingus draudžiamųjų energijų tarpus ir artimas gardelės pastoviasias, tai būtų: 1) GaP ir AlP; 2) Ge, GaAs, ZnSe ir AlAs; 3) InAs, ZnTe, GaSb ir AlSb; 4) Sn, InSb ir CdTe (žr. 1 pav.). Geros kristalinės sandūros gaunamos, pavyzdžiui, tarp GaAs ir AlAs, tarp InAs ir GaSb, tarp InSb ir CdTe.



**1 pav.** Kubinės gardelės puslaidininkių draudžiamosios energijos tarpo vertės kambario temperatūroje. Abcisių ašyje atidėta kristalinės gardelės pastovioji. Sudaryta pagal [13, 14, 15].

Dviejų puslaidininkių „A” ir „B” junginio  $A_xB_{1-x}$  gardelės pastovioji randama pagal Vegard dėsnį

$$a_{AB}(x) = xa_A + (1-x)a_B; \quad (1.1)$$

čia  $x$  yra junginio sudėtis. Junginio  $A_xB_{1-x}$  draudžiamosios energijos tarpas išreiškiamas kvadratine priklausomybe

$$E_{gAB}(x) = xE_{gA} + (1-x)E_{gB} + x(1-x)b; \quad (1.2)$$

čia  $b$  yra vadinamas linkio parametru. Kai jis mažas,  $E_{gAB}(x)$  galime išreikšti tiesine priklausomybe

$$E_{gAB}(x) = xE_{gA} + (1-x)E_{gB}. \quad (1.3)$$

Kombinuojant įvairius junginius, galime gauti trigubus ar keturgubus junginius su skirtingomis gardelės pastoviosiomis ir draudžiamųjų energijų tarpais.

Kai dvigubi junginiai turi beveik artimas gardelės pastoviasias, tada ir trigubas junginys turi tą pačią gardelės pastoviąją. Tuo tarpu draudžiamosios energijos tarpas kinta tarp atitinkamų junginių verčių. Pavyzdžiui,  $Al_xGa_{1-x}As$

gardelės pastovioji yra beveik tokia pati kaip GaAs ir AlAs, nes jų gardelės pastoviųjų skirtumas yra tik  $\sim 0,14\%$ . Draudžiamosios energijos tarpas tarp  $\Gamma$  slėnių kinta nuo 1,425 eV iki 3,02 eV, esant kambario temperatūrai [16]. Tad pirmieji aukštos kokybės kvantiniai dariniai buvo išauginti iš GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As su  $x \leq 0,4$ . Šios sandūros buvo labiausiai tiriamos ir tapo tyrimų etalonais.

Tačiau neapsistojama vien tik ties GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantiniais nanodariniiais. Ieškomos naujos darinių kombinacijos. Pavyzdžiui, silicio ir GaP, AlP ar ZnS, taip pat germanio ir GaAs, AlAs ar ZnSe gardelių pastoviosios yra suderinamos, tačiau suformuoti gerų sandūrų tarp šių A<sub>IV</sub> ir A<sub>III</sub>B<sub>V</sub> (A<sub>II</sub>B<sub>VI</sub>) grupių nepavyksta dėl kovalentinio nesuderinamumo [17]. Siliciui geriausiai į porą tiktų germanis, tačiau jų gardelių pastoviosios gerokai skiriasi, gaunami dideli gardelės įtempimai. Būtent, nesuderintų gardelių puslaidininkių plonųjų sluoksnių tyrimai parodė, kad pirmieji nusodinti ant padėklo sluoksniai bando atkartoti padėklo gardelės pastoviają. Jei padėklo plokštumoje atomai sutankėja, tai jai statmena kryptimi – išretėja. Auga, taip vadinamas, įtemptasis sluoksnis. Tik pasiekus tam tikrą krizinį storį, sluoksnis relaksuoja – gardelės pastovioji grįžta prie savo įprastinės tūrinės vertės ir išnyksta įtempimai. Taigi, norint užauginti tobulus nesuderintų gardelės pastoviųjų kvantinius darinius, turime auginti plonus sluoksnius, t. y. žemiau krizinio storio ribos. Tokie dariniai auginami naudojant sandūras GaAs/GaAsP, InP/GaInAs, Si/SiGe, AlGaAs/GaInAs. Šiuo atveju gaunami įtemptieji dariniai.

Dabar MPE būdu daugiausiai auginamos tokios įvairiatarpės sandūros: GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, InP/Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>As, In<sub>0,53</sub>Ga<sub>0,47</sub>As/In<sub>0,52</sub>Al<sub>0,48</sub>As, In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs, In<sub>0,53</sub>Ga<sub>0,47</sub>As/AlAs, InAs/GaSb, InAs/In<sub>0,52</sub>Al<sub>0,48</sub>As, InAs/GaAlSb, InGaAlAs/InP, GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>Sb, InGaAlSb/AlGaAsSb, InGaP/InGaAlP, In<sub>x</sub>Al<sub>1-x</sub>P/GaAs, Si/Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x</sub>, ZnSe/ZnMgSe, CdTe/ZnTe, HgTe/CdTe, Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>Sb/GaSb, GaAs<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub>/GaAs, GaN/AlN, (Al,In)N/GaN, GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N. Naudojantis metaloorganine dujų epitaksija galima taip pat auginti sandūras iš įvairių A<sub>IV</sub>, A<sub>III</sub>B<sub>V</sub>, A<sub>II</sub>B<sub>VI</sub>, A<sub>IV</sub>B<sub>V</sub>C<sub>VI</sub> puslaidininkių. Šiuo metu didelis kiekis A<sub>IV</sub>,

$A_{II}B_{VI}$ ,  $A_{III}B_V$  puslaidininkių, bei  $A_{II}B_{VI}$ ,  $A_{III}B_V$  puslaidininkių trigubųjų ir keturgubųjų junginių naudojami kvantinių darinių auginimui. Šie dariniai naudojami tyrimams ir praktiniams tikslams. Naujų medžiagų paiešką kryptingai toliau vykdo juostinės sandaros inžinerija.

## **1.2 GaAs ir Al(Ga)As tūrinių kristalų savybės**

GaAs ir AlAs atomai sudaro cinko blizgio kristalinę gardelę, kurios erdvinė grupė  $T_d^2(F\bar{4}3m)$ . Ši simetrija užrašoma formule  $3L^24L^36P$ , reiškiančia, kad gardelė turi 3 antros eilės, 4 trečios eilės simetrijos ašis ir 6 simetrijos plokštumas. Ši gardelė neturi inversijos centro. Ga(Al)As gardelę galima įsivaizduoti kaip dvi centruoto paviršiaus kubines gardeles, sudarytas iš Ga(Al) ir As atomų ir įdėtas viena į kitą. Šios dvi gardelės lygiagrečios viena kitai ir perstumtos per ketvirtą pagrindinės įstrižainės.

Kubinės simetrijos puslaidininkių energinė juostinė sandara yra labai panaši. Laidumo juostą sudaro  $\Gamma(k=0)$ , X ir L energiniai slėniai. Čia  $\Gamma$ , X ir L žymi ypatinguosius taškus Brillouin zonoje. Valentinė juosta taške  $k=0$  susideda iš trijų juostų. Dvi viršutinės mažiausios energijos juostos yra sunkiųjų ir lengvųjų skylių, o trečioji dėl sukinių ir orbitinio momento sąveikos yra atskilusi. Labiau skiriasi medžiagų charakteristikos: dielektrinės skvarbos, Luttinger parametrai, krūvininkų efektinės masės ir draudžiamųjų energijų tarpai.

Tačiau tarp GaAs ir AlAs yra vienas esminis skirtumas. GaAs laidumo juostos slėniai išsidėstę pagal energijas  $\Gamma$ -X-L tvarka, o AlAs – X-L- $\Gamma$ . Trumpai tariant, GaAs vyksta tiesioginiai optiniai šuoliai tarp žemiausios laidumo juostos ir valentinės juostos. Tuo tarpu AlAs optiniai šuoliai yra netiesioginiai. Todėl šuolių metu elektronas turi papildomai sugerti ar išspinduliuoti optinį fononą.

GaAs ir AlAs pagrindiniai fizikiniai parametrai, esant kambario temperatūrai, pateikti 1 lentelėje.

**1 lentelė.** GaAs, AlAs parametrai kambario temperatūroje

Parametras	GaAs	AlAs
$a, \text{Å}$	5,65325 <sup>a,b</sup>	5,6611 <sup>b,c</sup>
$\rho, \text{g/cm}^3$	5,360 <sup>e</sup>	3,760 <sup>e</sup>
$\epsilon_{\text{st}}$	12,85 <sup>a</sup> ; 13,18 <sup>e</sup>	10,06 <sup>e</sup>
$\epsilon_{\infty}$	10,89 <sup>a,c</sup>	8,16 <sup>e</sup>
$E_g, \text{eV}$	1,424( $\Gamma_c - \Gamma_v$ ) <sup>e</sup>	2,168( $X_c - \Gamma_v$ ) <sup>e</sup>
$m_e/m_0$	0,0632 <sup>a</sup>	0,124 <sup>d</sup>
$\gamma_1$	6,85 <sup>e</sup>	4,04 <sup>f</sup>
$\gamma_2$	2,1 <sup>e</sup>	0,78 <sup>f</sup>
$\gamma_3$	2,9 <sup>e</sup>	1,57 <sup>f</sup>

<sup>a</sup> [18], <sup>b</sup> [19], <sup>c</sup> [16], <sup>d</sup> [20], <sup>e</sup> [21], <sup>f</sup> [22].

Kubinės simetrijos  $A_{\text{III}}B_{\text{V}}$  puslaidininkių laidumo juosta, kurios minimumas yra  $\Gamma_6$  taške, turi sferinę simetriją. Todėl elektronų efektinė masė įvairiomis kristalografinėmis kryptimis yra vienoda. Tačiau valentinių juostų, kurių maksimumai yra  $\Gamma_8$  taške, izoenerginiai paviršiai yra anizotropiniai ir priklauso nuo kristalografinės kristalo krypties. Dėl šios priežasties skylių efektinės masės įvairiomis kristalografinėmis kryptimis yra skirtingos. Jos išreiškiamos per Luttinger parametrus [19]. Pavyzdžiui, [001] arba  $z$  kryptimi sunkiųjų ir lengvųjų skylių efektinės masės

$$\left(m_{hh}^*\right)^{[001]} = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_2} \text{ ir } \left(m_{lh}^*\right)^{[001]} = \frac{m_0}{\gamma_1 + 2\gamma_2}; \quad (1.4)$$

čia  $m_0$  yra laisvo elektrono masė. Kitomis kryptimis skylių masės:

$$\left(m_{hh}^*\right)^{[110]} = \frac{m_0}{1/2(2\gamma_1 - \gamma_2 - 3\gamma_3)} \text{ ir } \left(m_{lh}^*\right)^{[110]} = \frac{m_0}{1/2(2\gamma_1 + \gamma_2 + 3\gamma_3)}, \quad (1.5)$$

$$\left(m_{hh}^*\right)^{[111]} = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_3} \text{ ir } \left(m_{lh}^*\right)^{[111]} = \frac{m_0}{\gamma_1 + 2\gamma_3}. \quad (1.6)$$

Uždaviniams supaprastinti naudojamas izotropinis artinys. Tuomet skylių efektinės masės išreiškiamos [23]



$$m_{hh}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\bar{\gamma}} \text{ ir } m_{lh}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 + 2\bar{\gamma}}; \quad (1.7)$$

čia parametras  $\bar{\gamma}$  lygus

$$\bar{\gamma} = \frac{2\gamma_2 + 3\gamma_3}{5}. \quad (1.8)$$

Galime pažymėti, kad, esant sudėčiai  $x$  mažesnei nei 0,45,  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  savybės yra panašios į GaAs, o kai  $x > 0,45$  – artimesnės AlAs. Trigubojo junginio  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  dalis parametrų: gardelės pastovioji, efektinės masės ar dielektrinės skvarbos, kinta tiesiškai nuo sudėties  $x$ . Tačiau energiniai atstumai tarp slėnių aprašomi kvadratinėmis interpoliacinėmis lygtimis [24]. Draudžiamųjų energijų tarpai  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  puslaidininkiui aprašomi formulėmis [16]

$$E_g = 1,424 + 1,247x, \quad (1.9)$$

kai  $0 \leq x \leq 0,45$  ir

$$E_g = 1,900 + 0,125x + 0,143x^2, \quad (1.10)$$

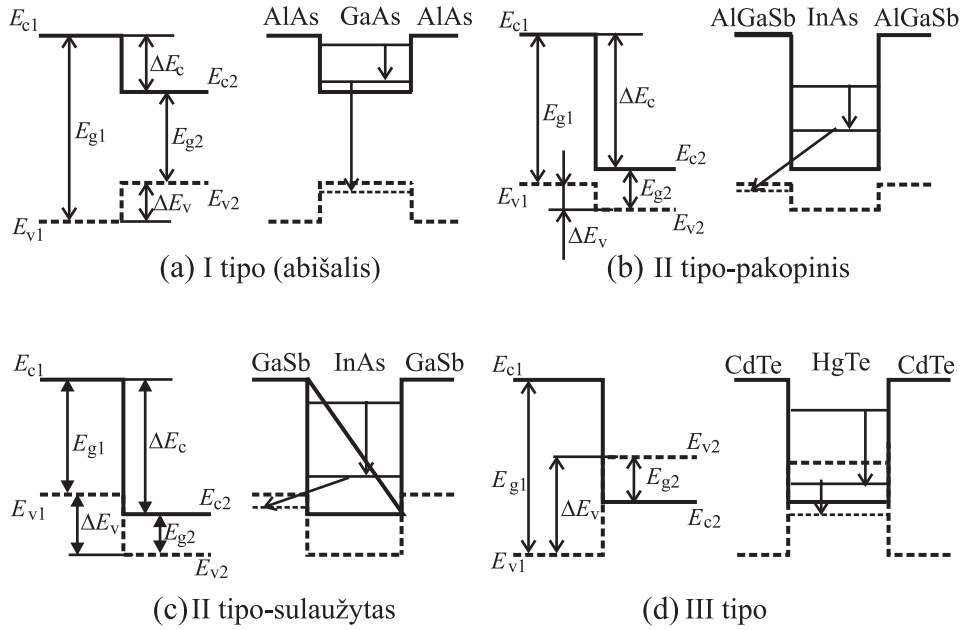
kai  $0,45 < x \leq 1$ . Didinant junginio sudėtį  $x$ ,  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  tampa netiesioginiu puslaidininkiu, kai  $x > 0,45$ .

### **1.3 Dvimačių kvantinių darinių tipai**

Kiekvienam puslaidininkiui patikimai yra nustatomas draudžiamosios energijos tarpas. Todėl mes galime rasti, koks bus dviejų puslaidininkių draudžiamųjų energijų tarpų skirtumas  $\Delta E_g$ . Suformavus darinį, svarbu žinoti ne tik energijos juostų sandarą, bet ir valentinės ar laidumo juostos padėtį vakuume atžvilgiu. Kai sandūra sudaroma iš GaAs ir  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  trigubojo junginio, tuomet dar reikia žinoti kaip juostos sandara keičiasi nuo junginio sudėties  $x$ .

Pasinaudokime idealizuotu įvairiatarpės sandūros modeliu, kuriame energijos juostų diagramos konstruojamos galvojant, kad medžiagų energinė

juostinė sandara nesikeičia iki pat sandūros ribos. Tai reiškia, kad neatsižvelgiama į erdvinį krūvį ties sandūros riba. Sudarius tokias sandūras, naudojant įvairias puslaidininkines medžiagas, galime gauti keturis juostų sudūrimų variantus, pavaizduotus 2 paveiksle. Pagal juostų sudūrimo suformuotus potencialo trūkius, jos vadinamos I-ojo, II-ojo ir III-iojo tipo sandūromis [25].



**2 pav.** Įvairiatarpė sandūra (kairėje) ir kvantiniai šuliniai (dešinėje). Galimi elektronų šuoliai kvantiniuose šuliniuose pavaizduoti rodyklėmis.

Kai vienos medžiagos draudžiamosios energijos tarpas uždengia kitos medžiagos draudžiamosios energijos tarpą (žr. 2 (a) pav.), turime I-ojo tipo arba abišali juostų sudūrimą. Potencialo trūkius  $\Delta E_c$  laidumo bei  $\Delta E_v$  valentinei juostoms, galime išreikšti kaip  $\Delta E_c = E_{c1} - E_{c2}$  ir  $\Delta E_v = E_{v1} - E_{v2}$  arba per draudžiamųjų energijų tarpų skirtumą

$$\Delta E_c = Q(E_{g1} - E_{g2}) = Q\Delta E_g, \quad (1.11)$$

$$\Delta E_v = (1 - Q)\Delta E_g; \quad (1.12)$$

čia  $Q$  yra juostų trūkio parametras, priklausantis nuo medžiagų poros. Jis gali

kisti nuo 0 iki 1. Norint sukurti kvantinius šulinius, medžiagos turi būti skirtingų draudžiamųjų energijų tarpų ( $E_{g1} > E_{g2}$ ), pavyzdžiui,  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ,  $\text{InP}/\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ . I-ojo tipo sandūrų dariniuose ir elektronai, ir skylės yra lokalizuojami mažesnio draudžiamosios energijos tarpo medžiagoje.

Atsižvelgiant į sandūrų ypatybes, gauname, kad I-ojo tipo dariniuose elektronų ir skylių poros sąveikauja stipriau ir greičiau rekombinuoja negu II-ojo tipo dariniuose. Tačiau II-ojo tipo dariniuose elektrono ir skylės poros gyvavimo trukmė didesnė dėl jų atskyrimo realioje erdvėje. II-ojo tipo-pakopinės sandūros darinių optinės spinduliuotės energija yra mažesnė negu jos atskirų medžiagų, kadangi jose lokalizuotų elektronų ir skylių energijų skirtumas yra mažesnis negu tų medžiagų draudžiamųjų energijų tarpai.

Įvairių darinių tipas gali priklausyti ne tik nuo pasirinktų medžiagų, bet ir nuo sluoksnių storio. Pavyzdžiui,  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  dariniai gerai žinomi kaip I-ojo tipo, tačiau jei  $x > 0,45$  galime parinkti tokį  $\text{GaAs}$  sluoksnių storį, kad  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  laidumo juostos X slėnis turėtų mažesnę energiją nei  $\text{GaAs}$   $\Gamma$  slėnis. Tuomet gauname II-ojo tipo darinį. Taip pat darinio tipas gali pakisti dėl didelio slėgio [26, 27], temperatūros pokyčio [28] ar išorinio elektrinio lauko [29]. Norėdami tiksliau apibūdinti kvantinius nanodarinius papildomai nurodome ar jie įtempti, ar suderintos jų gardelės.

Disertacijoje bus nagrinėjami  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  I-ojo tipo kvantiniai šuliniai. Juos galime auginti įvairių matmenų, kadangi darinį sudarančių medžiagų kristalinės gardelės suderintos. Tačiau  $\text{GaAs}$  kvantinio šulinio plotis neįgys vertės, kuriai esant jau tampa II-ojo tipo kvantiniu šuliniu.

#### **1.4 $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ kvantiniai šuliniai**

Užauginus pirmąsias supergardenes, jas imta intensyviai tirti. Taip pat didelio mokslininkų dėmesio susilaukė ir jos vienas elementas – kvantinis šulinys. Kvantinių šulinių savybės priklauso nuo kvantinio šulinio pločio, nuo įterptų priemaišų tipo ir kiekio, nuo legiravimo būdo. Toliau trumpai apžvelgsime I-ojo tipo  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  kvantinių šulinių savybes ir tyrimus.

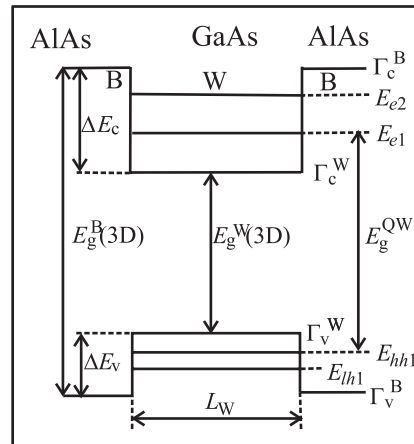
Pirmuoju teoriniu skaičiavimu apie kvantinių šulinių savybes galėtume laikyti kvantinės mechanikos uždavinį – dalelė begalinio gylio potencinėje duobėje. Jos energijos spektras apskaičiuojamas pagal lygtį

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{n\pi}{L_W} \right)^2; \quad (1.13)$$

čia  $n = 1, 2, \dots$  – sveikasis skaičius,  $L_W$  – duobės plotis,  $m^*$  – dalelės masė,  $\hbar$  – Planck pastovioji.

Iš šio uždavinio seka dvi svarbios išvados. Pirmoji, kad dalelė įgyja tik diskretines energijos vertes arba, kitaip tariant, dalelės energija kvantuojasi. Antroji, kad diskretinės energijos vertės priklauso nuo duobės pločio. Kuo siauresnė yra duobė, tuo didesnės energijų vertės. Atstumas tarp energijos lygmenų yra proporcingas  $n^2$ .

Aptarsime realią sistemą, kuri sudaryta iš dviejų puslaidininkių. Tarkime į AlAs kristalą įterptas plonas  $L_W$  storio GaAs sluoksnis. Tūrinę AlAs kristalo dalį žymėsime B (barjeras), o įterptą kvantinį šulinį – W. Tokio darinio energinė schema pavaizduota 3 paveiksle. Šio darinio krūvininkų energinės būsenos  $z$  kryptimi, statmena GaAs sluoksniui, kvantuosis. Tačiau krūvininkų energinės būsenos  $x$  ir  $y$  kryptimis išliks tokios kaip ir tūrinio kristalo. Norint rasti krūvininkų energines būsenas  $z$  kryptimi, sprendžiama nuostovioji Schrödinger lygtis [30, 31]



**3 pav.** GaAs/AlAs kvantinio šulinio schema

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] \psi(z) = E_n \psi(z); \quad (1.14)$$

čia  $V(z)$  yra barjero aukštis,  $E_n$  – ieškoma krūvininko  $n$ -ojo lygmens energija, o

$\psi(z)$  – krūvininko banginė funkcija. Laidumo ir valentinei juostoms Schrödinger lygtys sprendžiamos atskirai. Energija elektronams atskaitoma nuo laidumo juostos dugno, o skylėms – nuo valentinės juostos viršaus. Barjero aukštį GaAs/AlAs sandūrų atveju elektronams ir skylėms randame iš energinių juostų trūkio pagal (1.11) ir (1.12) lygtis.

Atsižvelgus į baigtinį barjerų aukštį arba krūvininkų galimybę tuneliuoti į barjerą, efektinės masės pokytį barjere ir šulinyje bei pareikalavus, kad sandūrose krūvininkų banginės funkcijos būtų lygios, o jų išvestinės tolydinės, gaunama lygčių sistema [31]

$$\begin{cases} \operatorname{tg}\left(\frac{m_w^* E_n L_w^2}{2\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{m_w^* (\Delta E_{c,v} - E_n)}{m_B^* E_n}\right)^{\frac{1}{2}} \\ \operatorname{ctg}\left(\frac{m_w^* E_n L_w^2}{2\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} = -\left(\frac{m_w^* (\Delta E_{c,v} - E_n)}{m_B^* E_n}\right)^{\frac{1}{2}} \end{cases}; \quad (1.15)$$

čia  $m_w^*$  ir  $m_B^*$  yra elektrono, sunkiųjų arba lengvųjų skylių efektinės masės šulinyje ir barjere. Transcendentines (1.15) lygtis galima spręsti grafiškai, skaitmeniškai, pasinaudojus iteracine procedūra, arba naudojantis šiuolaikiškais kompiuterinėmis programomis, pavyzdžiui, MATHEMATICA.

Tūrinio GaAs kristalo valentinės juostos lengvųjų ir sunkiųjų skylių pojuosčiai yra išsigimę ir jų energijos  $k=0$  taške sutampa. Tuo tarpu kvantiniame šulinyje šis išsigimimas išnyksta ir gaunami du skirtingų energijų lengvųjų ir sunkiųjų skylių pojuosčiai. Kadangi sunkiųjų ir lengvųjų skylių efektinės masės skiriasi, tai gausis ir skirtingos energinės būsenos sunkiosioms ir lengvosioms skylėms. Sunkiųjų skylių dimensinio kvantavimo energija yra mažesnė negu lengvųjų skylių dimensinio kvantavimo energija. Todėl žemiausias lygmuo kvantinio šulinio valentinėje juostoje atitinka sunkiąsias skyles. 3 paveiksle pažymėta  $E_{e1}$  yra elektronų pagrindinė  $n=1$  energinė būsena kvantiniame šulinyje,  $E_{hh1}$  – sunkiųjų skylių, o  $E_{lh1}$  – lengvųjų skylių pagrindinės energinės būsenos. Mažiausias energijų atstumas tarp  $E_{hh1}$  ir  $E_{e1}$

vadinamas kvantinio šulinio draudžiamosios energijos tarpu, kuris lygus

$$E_g^{QW} = E_g^W + E_{e1} + E_{hh1}. \quad (1.16)$$

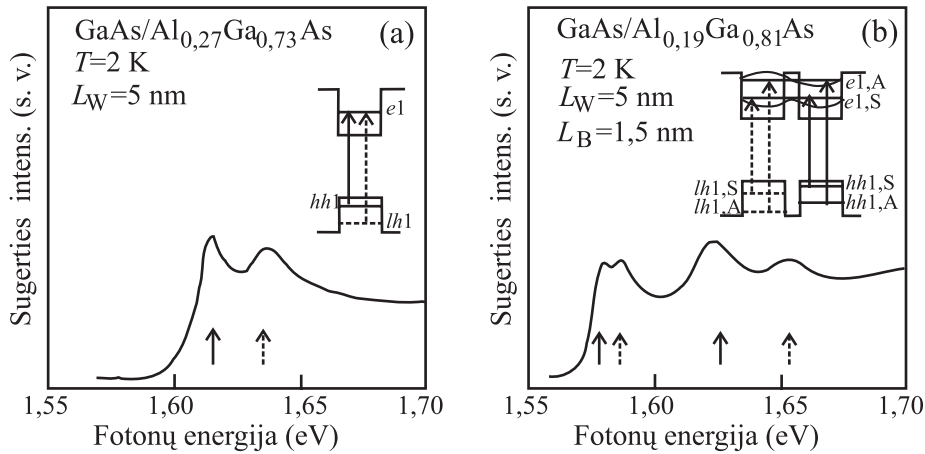
Atstumą tarp  $E_{hh1}$  ir  $E_{e1}$  irgi vadinsime draudžiamosios energijos tarpu, tik pažymėdami, kad jis priskiriamas lengvosios skylės. Dar viena svarbi ypatybė yra ta, kad baigtinio gylio kvantiniuose šuliniuose yra baigtinis lygmenų skaičius. Įdomu ir tai, kad sunkiųjų skylių energijos lygmenų yra daugiau negu lengvųjų skylių energijos lygmenų.

Verta paminėti, kad kvantiniuose šuliniuose išilginė arba judėjimo  $xy$  plokštumoje sunkiųjų ir lengvųjų skylių efektinės masės persimaišo: sunkiosios skylės palengvėja, o lengvosios pasunkėja. Elektronų efektinė masė taip pat pakinta. Nagrinėjant krūvininkų energijos lygmenis reikia įskaityti neparaboliškumą, kuris svarbus siauriems kvantiniams šuliniams. Taip pat elektronų išilginė efektinė masė yra kitokia negu efektinė masė statmena kryptimi ir negu tūriniame kristale [32]. Tai svarbu optinėms savybėms nes efektinė masė statmena kryptimi įtakoja optinių šuolių energiją. Išilginė efektinė masė ir neparaboliškumas svarbūs apskaičiuojant eksitonų ryšio energiją.

Dažniausiai, norint sustiprinti kokį nors reiškinį, auginamas ne vienas, o visa eilė pasikartojančių kvantinių šulinių viename kristale. Tokį darinį vadinsime kartotinių kvantinių šulinių sistema. Priklausomai nuo barjero aukščio ir pločio  $L_B$  (atstumo tarp kartotinių kvantinių šulinių), kvantiniai šuliniai gali įtakoti vienas kitą. Dėl šios priežasties pasikeičia krūvininkų energinės būsenos. Sąveika pasireišk tuomet, kai gretimų kvantinių šulinių išiskverbusios į barjerą banginės funkcijos pradės persikloti. Sistema sudaryta iš daug sąveikaujančių kvantinių šulinių suformuoja supergardelę. Joje vietoje pavienių energinių lygmenų susidaro draudžiamųjų ir galimų energijų juostos. Siaurėjant barjerui, izoliuoto kvantinio šulinio lygmenys slenka aukštyn ir išplinta į minijuostas, kurios plėtėja didėjant minijuostos numeriui. Šis plėtėjimas susijęs su didėjančiu banginių funkcijų persiklojimu.

Sąveikaujančiųjų kvantinių šulinių sąlygoti pokyčiai atsispindi ir optiniuose spektruose, kurie buvo gauti R. Dingle su bendraautoriais [33] ir yra pavaizduoti 4 paveiksle.

Akivaizdu, kad optiniams rezultatams paaiškinti ar apskaičiuoti, reikia žinoti ar būtina atsižvelgti į kvantinių šulinių sąveiką, ar galima elektronų ir skylių būsenas šuliniuose laikyti nepriklausomomis.



**4 pav. (a)** pavienio GaAs/Al<sub>0,27</sub>Ga<sub>0,73</sub>As ir **(b)** dvigubo GaAs/Al<sub>0,19</sub>Ga<sub>0,81</sub>As kvantinio šulinio sugerties spektrai iš [33] šaltinio.

Mažinant Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As ( $x > 0,45$ ) barjeriais apriboto GaAs kvantinio šulinio plotį, galime gauti atvejį, kai GaAs  $\Gamma$  slėnio lygmuo bus virš Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As X slėnio lygmens. Tuomet sukurtume II-ojo tipo kvantinį šulinį su netiesioginiais optiniais krūvininkų šuoliais. Dariniuose su įvairios sudėties  $x$  Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As barjeriais, tai įvyksta esant skirtingiems kvantinio šulinio pločiams. Pavyzdžiui, siaurame GaAs/AlAs kvantiniame šulinyje virsmas iš I-ojo į II-ąjį tipą įvyksta kai kvantinio šulinio plotis  $L_w \approx 3,7$  nm [34]. K. J. Moore su bendraautoriais [35] eksperimentiškai nustatė, kad siaurų GaAs/AlAs kartotinių kvantinių šulinių atveju gali įvykti atvirkštinis iš II-ojo tipo į I-ąjį tipą virsmas. Toks virsmas įvyksta kai  $L_w \approx 2,5$  nm pločio GaAs kvantiniai šuliniai yra atskirti  $L_b \approx 1-1,5$  nm pločio AlAs barjeriais. Tai paaiškinama tuo, kad dėl GaAs  $\Gamma$  būsenų sąveikos sumažėja  $\Gamma$  slėnio lygmenų energija.

### 1.4.1 Juostų trūkiai GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantiniuose šuliniuose

Kvantinių šulinių ir supergardelių savybės priklauso nuo juostų trūkių, kurie kartu yra kvantinio šulinio potencinio barjero aukštis  $V$ . Vienas iš seniausiai žinomų būdų teoriškai įvertinti juostų trūkių dydį sandūrose yra pagal elektroninio giminiškumo arba Anderson taisyklę [36]. Pagal šią taisyklę laidumo juostos trūkis lygus

$$\Delta E_c = \chi_B - \chi_A; \quad (1.17)$$

čia  $\chi$  yra medžiagų „A” ir „B” elektroninis giminiškumas, atskaitomas nuo žemiausio laidumo juostos krašto iki vakuomo lygmens. Tačiau šią taisyklę galime taikyti tik tam tikroms sandūroms.

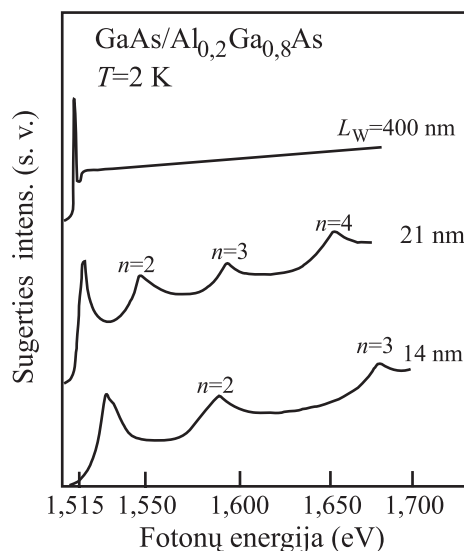
Kiekybiškai geriau įvertinti juostų trūkius galime naudodamiesi Frensel-Kroemer [37], Van de Walle [38, 39], Harrison atominių orbitalių [40] teoriniais metodais arba eksperimentiškai iš ultravioletinės ar rentgeno fotoelektroninės spektroskopijos [41] ar iš  $C-V$  profilio [42, 43].

1974 metais R. Dingle su bendraautoriais [44] tirdami infraraudonųjų spindulių sugertį parodė, kad GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As laidumo ir valentinės juostos potencialų trūkių santykis  $\Delta E_c/\Delta E_v$  yra apie 88:12. Tad pirmuosiuose darbuose, apskaičiuojant GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantinių šulinių energinius spektrus, buvo naudojamas 85:15 trūkių santykis. Tokio dydžio gaunamas ir naudojantis Anderson taisykle. 1980 metais pasirodė pirmasis darbas [42], o 1984 metais dar keletas eksperimentinių darbų [43, 45, 46] įrodančių, kad šis santykis yra netikslus. Šių darbų autoriai savo rezultatams paaiškinti naudojo laidumo juostos trūkį, kuris sudarė 50–66 % draudžiamosios energijos tarpo skirtumo  $\Delta E_g$ . Šios vertės artimos [45] darbe pasiūlytai ir dabar GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As sandūrai naudojamai trūkio parametro vertei  $Q \approx 0,6$ . Ši vertė taikoma visoms sudėties  $x$  vertėms, kai energijų skirtumas atskaitomas tarp  $\Gamma$  slėnių.



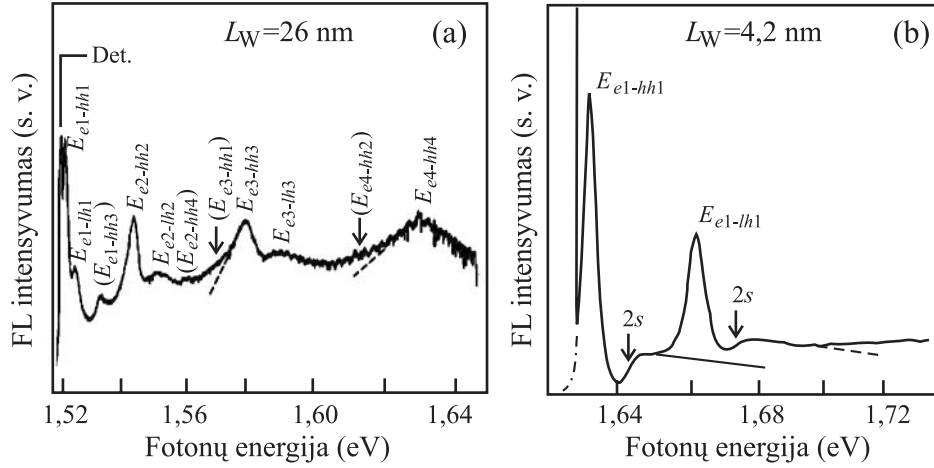
### 1.4.2 GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantinių šulinių optinės savybės

GaAs nanometrinių sluoksnių talpinimas tarp Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As barjerų apriboja elektronų ir skylių judėjimą GaAs potencinėje duobėje. Energijos lygmenys kvantuoja auginimo kryptimi ir padidina draudžiamosios energijos tarpą nuo infraraudonosios iki matomosios spinduliuotės srities. Tiek GaAs kvantinių šulinių, tiek kartotinių kvantinių šulinių sugerties ir spinduliuotės linijos pavidalas yra eksitoninis [33, 44, 47, 48]. R. Dingle su bendraautorais gauti GaAs/Al<sub>0,2</sub>Ga<sub>0,8</sub>As sugerties spektrai pavaizduoti 5 paveiksle [44]. Siaurėjant kvantiniams šuliniams, sugerties spektre stebimos su vis aukštesniais  $n$ -osios eilės energijos lygmenimis susijusios eksitoninės smailės. Dar labiau mažinant kvantinio šulinio plotį, sugerties spektre išskiriamos pagrindinio lygmens  $n = 1$  sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitoninės smailės (taip pat žr. 4 (a) pav.).



R. C. Miller su bendraautorais stebėti GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantinių šulinių žadinimo FL spektrai pavaizduoti 6 paveiksle [47, 48]. Šie rezultatai taip pat patvirtina eksitoninę spektro prigimtį. Skirtingai nuo sugerties spektrų, net ir 26 nm pločio kvantinio šulinio žadinimo FL spektre aiškiai išskiriamos sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitoninės smailės. Tuo tarpu siauro kvantinio šulinio žadinimo FL spektre išskiriamos sunkiųjų ir lengvųjų skylių ne tik pagrindinės ( $1s$ ) eksitoninės būsenos, bet ir sužadintųjų eksitonų ( $2s$ ) padėtys, kurios susilieja su juosta-juosta šuolių spinduliuote (žr. 6 (b) pav.). Vėliau atliktuose eksperimentiniuose tyrimuose [49, 50] buvo stebimos akivaizdžios

sužadintųjų eksitonų smailės. Visa tai rodo, kad kvantinių šulinių optinėms savybėms yra svarbūs ne tik šuoliai tarp kvantuotų būsenų bet ir eksitoninė sąveika.



**6 pav.** Žadinimo FL spektrai **(a)** kartotinių  $L_W = 26$  nm pločio  $\text{Ga}_{0,28}\text{Al}_{0,72}\text{As}$  kvantinių šulinių pagal [47] šaltinį, **(b)** vieno  $L_W = 4,2$  nm pločio  $\text{Ga}_{0,37}\text{Al}_{0,63}\text{As}$  kvantinio šulinio pagal [48] šaltinį. Det. žymi detektoriaus padėtį.  $E_{en-hhn}$  ir  $E_{en-lhn}$  – sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitonų energijos. Skliaustuose nurodyti draudžiami šuoliai. Rodyklės  $2s$  rodo sunkiųjų ir lengvųjų skylių sužadintųjų eksitonų padėtis.

**Šuolių atrankos taisyklės.** Elektronų šuoliai iš valentinės į laidumo juostą ir atvirkščiai vyksta esant tai pačiai banginio vektoriaus  $\vec{k}$  vertei. Į kurią lygmenį pateks elektronas, pirmiausia priklauso nuo sugerto fotono energijos. Papildomas atrankos sąlygas diktuoja matricinis elementas priklausantis nuo pradinės ir galinės būsenos banginių funkcijų persiklojimo. Banginės funkcijos gali būti simetrinės (S) arba antisimetrinės (A) (žr. 4 (b) pav.). Simetriniuose kvantiniuose šuliniuose tarpjuostiniai šuoliai galimi tik tarp lygmenų su simetrinėmis banginėmis funkcijomis arba tarp lygmenų su nesimetrinėmis banginėmis funkcijomis. Šią taisyklę būtų galima užrašyti

$$n' + n = \text{lyginis skaičius.} \quad (1.18)$$

Stačiakampiuose kvantiniuose šuliniuose stebimas mažesnis smailių skaičius negu paraboliniuose [51] ar pusiauparaboliniuose [52] kvantiniuose šuliniuose. Tai atskleidžia dar vieną empirinę atrankos taisyklę, kurią reikia

taikyti optiniams šuoliams stačiakampiuose kvantiniuose šuliniuose

$$n' = n. \quad (1.19)$$

Optiniai šuoliai atitinkantys (1.19) taisyklę yra patys intensyviausi. Tai patvirtina ir eksperimentiniai rezultatai pateikti 4 – 6 paveiksluose. Kol kas eksperimentiškai tik žadinimo FL spektruose buvo stebėti silpni  $n' \neq n$  šuoliai. Pavyzdžiui, tarp pirmojo elektronų lygmens  $e1$  ir trečiojo sunkiųjų skylių lygmens  $hh3$ . Žadinimo fotoluminescencijos tyrimai [53] ir teorinė sugerties spektrų analizė [54] parodė, kad gali būti stebimi ir pagal (1.18) atrankos taisyklę draudžiami šuoliai tarp  $e1$  ir  $hh2$ ,  $e2$  ir  $lh1$  lygmenų. Tai paaiškinama stipriomis sąveikomis tarp  $X_{e1-hh2}$  eksitono sužadintos  $2p$  būsenos ir  $X_{e1-lh1}$  eksitono kontinuumo, bei tarp  $X_{e2-lh1}$  eksitono sužadintos  $2p$  būsenos ir  $X_{e2-hh2}$  eksitono kontinuumo.

Naudojant tyrimams poliarizuotą šviesą pasireiškia dar viena atrankos taisyklė, susijusi su Bloch funkcijomis. Šios funkcijos yra skirtingos sunkiųjų ir lengvųjų skylių juostoms. Todėl ši taisyklė gali drausti šuolius iš sunkiųjų skylių juostos ir leisti jiems vykti iš lengvųjų skylių juostos [55, 56] arba galima stebėti apskritiminės poliarizacijos laipsnio kitimą [31, 47]. Jei šviesa sklinda kvantinio šulinio plokštumoje ir jos poliarizacija lygiagreti  $z$  ašiai, elektrono optiniai šuoliai galimi tik į (iš) lengvųjų skylių pojuosčių (pojuosčio) [56]. Pasirinkus šviesos poliarizaciją statmeną  $z$  ašiai arba pakeitus šviesos sklidimą statmena kvantinio šulinio kryptimi galimi elektronų optiniai šuoliai ir į lengvųjų skylių, ir į sunkiųjų skylių pojuosčius.

Įdomus reiškinys, neturintis trimačio analogo, yra elektronų optiniai šuoliai tarp kvantinio šulinio pojuosčių. Šiuo atveju taip pat galioja įprastas optinių šuolių vertikalumo dėsnis, bei papildoma atrankos taisyklė:

$$n + m = \text{nelyginis skaičius.} \quad (1.20)$$

Praktiškai stebimi tik  $n = m \pm 1$  šuoliai, kurie yra patys intensyviausi. Pirmą kartą dvimačių elektronų tarppojuosciniai šuoliai stebėti 1985 metais [57].

Tolimesni šių šuolių tyrimai paskatino sukurti ir tobulinti kvantinių šulinių infraraudonųjų spindulių [58, 59] ir terahercų srities [60, 61] jutiklius bei kvantinius kaskadinius lazerius [62, 63].

### 1.4.3 Eksitonai kvantiniuose šuliniuose

Eksitonų įtaka kvantinių šulinių optinėms savybėms pasireiškia ne tik žemose temperatūrose, bet ir kambario ar aukštesnėje temperatūroje. Teoriniai skaičiavimai ir eksperimentiniai tyrimai rodo, kad kvantiniuose šuliniuose šviesos sugertį ir spinduliuotę lemia eksitoniniai reiškiniai, o tarpjuostiniai elektronų šuoliai sudaro tik nedidelę dalį sugerties ar spinduliuotės. Eksitonai labiau įtakoja optines savybes siauruose kvantiniuose šuliniuose. Juose labiau padidėja eksitonų ryšio energija bei osciliatoriaus stipris dėl didesnio krūvininkų judėjimo apribojimo.

Pirmieji eksitonų ryšio energijos skaičiavimai remiantis efektinės masės artiniu begalinio gylio kvantiniuose šuliniuose buvo atlikti darbuose [48, 64], o baigtinio gylio kvantiniuose šuliniuose – darbe [65]. Coulomb sąveikos uždavinys kvantiniame šulinyje sprendžiamas cilindrinėje koordinačių ( $\rho$ ,  $\phi$  ir  $z$ ) sistemoje naudojant Hamilton operatorių [65]:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{hh,lh}} \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_{hh,lh}} \frac{\partial^2}{\partial z_{hh,lh}^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{r}_{hh,lh}|} + V_e(z_e) + V_{hh,lh}(z_{hh,lh}) \quad ; \quad (1.21)$$

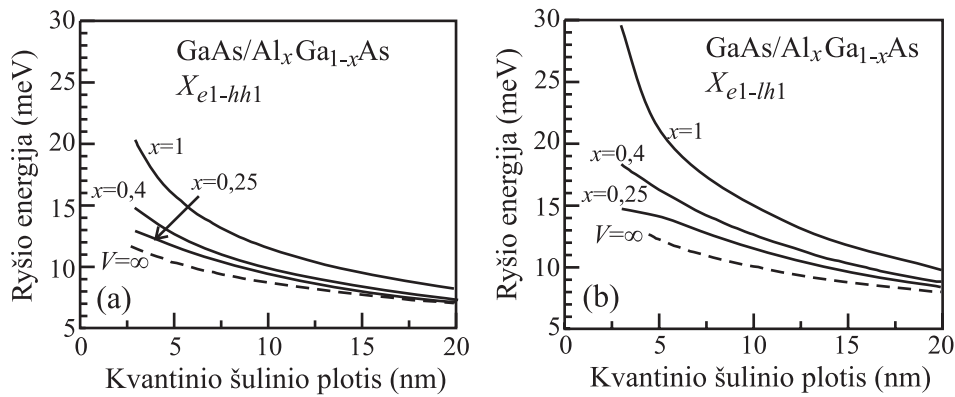
čia  $\vec{r}_e$  ir  $\vec{r}_{hh,lh}$  nurodo elektronų ir skylių padėtis.  $m_{hh,lh}$  yra sunkiųjų ir lengvųjų skylių efektinės masės  $z$  kryptimi, o  $\mu_{hh,lh}$  – elektronų ir sunkiųjų bei lengvųjų skylių redukuotosios masės plokštumoje statmenoje  $z$  ašiai. Šios masės išreiškiamos per Luttinger parametrus:

$$\frac{1}{m_{hh,lh}} = \frac{\gamma_1 \mp 2\gamma_2}{m_0} \quad , \quad (1.22)$$

$$\frac{1}{\mu_{hh,lh}} = \frac{1}{m_e} + \frac{\gamma_1 \pm \gamma_2}{m_0}. \quad (1.23)$$

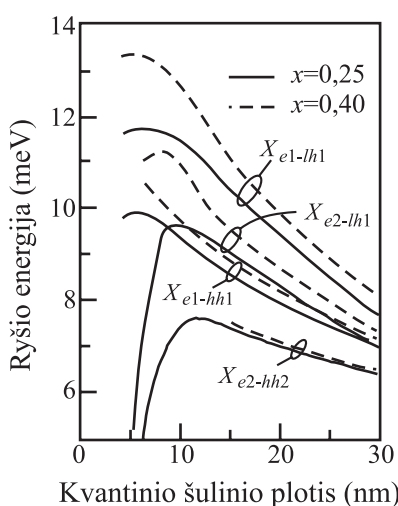
Begalinio gylio kvantiniuose šuliniuose apskaičiuota, kad siaurinant šulinio plotį dvimačių eksitonų, kai kvantinis šulinys be galo siauras  $L_w \rightarrow 0$ , ryšio energija padidėja keturis kartus lyginant su ryšio energija tūriniuose kristaluose. Netrukus buvo parodyta, kad baigtinio gylio kvantiniuose šuliniuose negalima pasiekti dvimačio atvejo [65]. Mažėjant kvantinio šulinio pločiui, eksitonų ryšio energija didėja, pasiekia maksimalią vertę ir pradeda mažėti. Ribiniais atvejais GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantiniuose šuliniuose, kai  $L_w \rightarrow \infty$  ir  $L_w \rightarrow 0$ , gaunamos eksitonų ryšio energijos kaip GaAs ir Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As tūriniuose kristaluose. Kiekvienu iš šių ribinių atvejų sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitonų ryšio energijos yra lygios. Tokiu būdu grįžtame prie tūrinių kristalų, kuriuose skylių būsenos yra išsigimusios.

Apskaičiuojant tikslesnes eksitonų ryšio energijas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantiniuose šuliniuose nepakanka vien supaprastinto efektinės masės modelio. Reikia atsižvelgti į realią elektronų ir skylių energijų juostinę sandarą, į šulinio ir barjero dielektrinių skvarbų skirtumus. Taip pat svarbus yra krūvininkų energijų juostų neparaboliškumas, tuo pačiu ir elektronų efektinės masės kvantinio šulinio plokštumoje priklausomybė nuo kvantinio šulinio pločio. Į visa tai atsižvelgta Lucio A. Andreani ir Alfredo Pasquarello darbe [32]. Apskaičiuotos sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitonų ryšio energijos GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantiniuose šuliniuose pavaizduotos 7 paveiksle ištisinėmis linijomis. Punktyrinėmis linijomis pavaizduotos begalinio gylio  $V = \infty$  kvantinio šulinio eksitonų ryšio energijos rastos naudojantis supaprastintu efektinės masės modeliu [65]. Įskaičius aukščiau minėtų reiškinių indėlį, L. A. Andreani ir A. Pasquarello gavo, kad siauruose GaAs/AlAs kvantiniuose šuliniuose eksitonų ryšio energija, kaip nekeista, padidėja daugiau negu keturis kartus lyginant su eksitonų ryšio energija tūriniame GaAs kristale.



**7 pav. (a)** sunkiųjų ir **(b)** lengvųjų skylių eksitonų ryšio energijos GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As pagal [32] šaltinį. Punktyrine linija pavaizduotos eksitonų ryšio energijos begalinio gylio kvantiniame šulinyje iš [65] šaltinio.

Nagrinėjant kvantinių šulinių optines savybes yra svarbūs ne tik pagrindiniai, bet ir aukštesnieji energiniai lygmenys. Su  $e2$  ir  $hh2$  lygmenimis susijusių sunkiųjų  $X_{e2-hh2}$  ir lengvųjų skylių  $X_{e2-lh1}$  eksitonų ryšio energijos buvo apskaičiuotos [66] darbe. Įvairių energinių lygmenų eksitonų ryšio energijų priklausomybė nuo GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantinio šulinio pločio, esant dviems Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As barjero sudėtims  $x = 0,25$  ir  $0,4$  pavaizduota 8 paveiksle. Su aukštesniais energiniais lygmenimis susijusių eksitonų  $X_{e2-hh2}$  ryšio energijos yra mažesnės negu  $X_{e1-hh1}$  eksitonų bei maksimalią vertę pasiekia esant didesniems kvantinio šulinio pločiams.



**8 pav.** Įvairių energinių lygmenų eksitonų ryšio energijos [66]

1990 metais Xing-Fei He pritaikė trupmeninės dimensijos erdvės modelį anizotropinių medžiagų optinėms savybėms apskaičiuoti [67, 68, 69]. Jis pateikė eksitonų, esančių anizotropinėse medžiagose, banginių funkcijų, ryšio energijos ir tarpjuostinio optinio spektro priklausomybę nuo erdvės parametro. Vėliau šis modelis buvo pritaikytas apskaičiuoti kvantinių šulinių eksitonų

ryšio energijoms [70, 71, 72, 73]. Gauti rezultatai yra artimi R. L. Greene su bendraautoriais rastoms vertėms [65].

Pagrindiniai būdai, kuriais eksperimentiškai nustatomos eksitonų ryšio energijos, yra žadinimo fotoluminescencijos [48, 49, 50, 55] ir magneto-optiniai [74] tyrimai.

Technologiniu požiūriu yra svarbu žinoti apie kvantinių šulinių kokybę. Vienas iš būdų apie tai spręsti yra eksitoninių linijų išplitimas žemose temperatūrose. Kuo siauresnės linijos, tuo kokybiškesni bandiniai. Eksitoninių linijų išplitimo priežastys ir priklausomybė nuo temperatūros detaliau nagrinėti [75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82] darbuose.

Laisvojo eksitono kvantiniame šulinyje linijos plotis  $\Gamma$  susideda iš dviejų dalių: nehomogeninės ir homogeninės [75, 76]:

$$\Gamma = \Gamma_0 + aT + \frac{b}{e^{\frac{\hbar\omega_{LO}}{kT}} - 1}; \quad (1.24)$$

čia  $\hbar\omega_{LO}$  yra optinio fonono energija,  $k$  – Boltzmann pastovioji,  $T$  – temperatūra. Antrasis ir trečiasis nariai apibūdina akustinių ir optinių fononų sąveiką su eksitonais. Fononų įtaka didėja kartu su temperatūra. Koeficientai  $a$  nurodo akustinių, o  $b$  – optinių fononų sąveikų su eksitonais stiprumą.  $\Gamma_0$  yra nuo temperatūros nepriklausanti linijos pločio nehomogeninė dalis, kurios dydį įtakoja trys veiksniai [77]. Pirmasis, savitasis eksitoninės linijos plotis, kuris gali būti rastas iš eilės sklaidos vyksmų: spindulinės rekombinacijos, sukinių apvertimo sklaidos, eksitonas-eksitonas sklaidos, eksitonas-krūvininkas sklaidos. Antrasis veiksnys, nehomogeninis linijos išplitimas, didėjantis nuo kvantinio šulinio pločio verčių išsibarstymo kartotiniuose dariniuose. Ir trečiasis veiksnys, kurį sąlygoja priemaišos bei gali būti rastas iš priemaišų sklaidos. Paskutiniai du veiksniai susiję su netobulumais kartotiniuose kvantiniuose šuliniuose ar kvantinių šulinių legiravimu priemaišomis.

#### 1.4.4 Priemaišos GaAs/Al(Ga)As kvantiniuose šuliniuose

Priemaišos kvantiniuose šuliniuose yra labai svarbios kuriant įvairius puslaidininkinių nanodarinių prietaisus. Pirmasis teoriškai nagrinėti priemaišų savybes kvantiniuose šuliniuose pradėjo G. Bastard 1981 m. [83]. Šiame Bastard darbe ir vėlesniuose kitų autorių darbuose [84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91] buvo parodyta, kad kvantiniame šulinyje priemaišos jonizacijos energija priklauso nuo jos padėties kvantiniame šulinyje ir nuo kvantinio šulinio pločio. Paminėsime keletą bendresnių atvejų, kurie padės lengviau suprasti apie priemaišų energines būsenas kvantiniuose šuliniuose.

Tarkime, priemaiša yra kvantinio šulinio pakraštyje arti barjero. Jeigu kvantinis šulinys yra pakankamai platus, tuomet priemaišos jonizacijos energija lygi [83, 92]

$$E_I(\text{krašte}) = \frac{1}{4} Ry; \quad (1.25)$$

čia  $Ry$  priemaišos jonizacijos (Rydberg) energija tūriniame kristale. Kvantinio šulinio krašte esančios priemaišos simetrija sumažėja, nes jos vienos pusės Coulomb potencialas yra apribotas barjeru ir banginė funkcija ties sienele turi būti lygi nuliui. Šios sąlygos negali tenkinti  $1s$  tipo banginės funkcijos, ir priemaišos negali įgyti pagrindinės būsenos energijos. Kraštinę sąlygą tenkina  $2p$  tipo banginės funkcijos, bet jas atitinka 4 kartus mažesnė energija.

Kitas labai svarbus ribinis atvejis yra, kai be galo aukštų barjerų kvantinis šulinys yra labai siauras. Toks darinys taptų grynai dvimatis (2D). Tuomet priemaišos energija, kaip ir dvimačio vandenilio atomo, lygi [93]

$$E_I = \frac{Ry}{(n-1/2)^2}, \quad n = 1, 2, \dots; \quad (1.26)$$

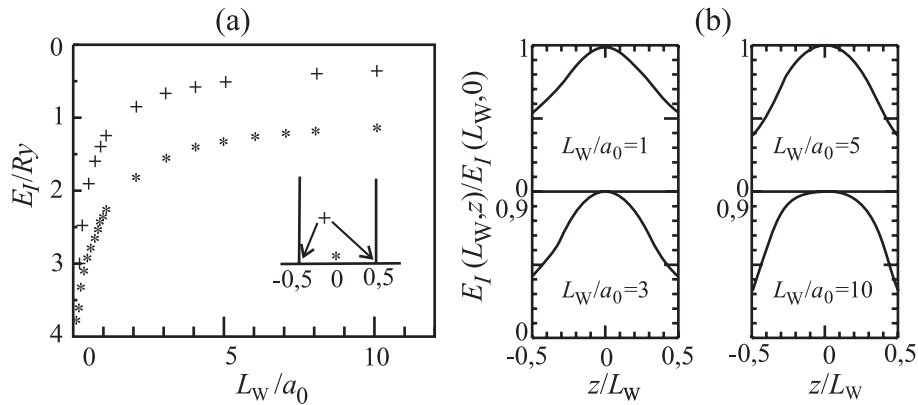
čia  $n$  – sveikasis skaičius. Priemaišos, esančios dvimačio kvantinio šulinio centre, jonizacijos energija, kai  $n = 1$ , lygi

$$E_I(\text{centre}) = 4Ry. \quad (1.27)$$



Priemaišos, kaip ir eksitono, jonizacijos energija dvimačiuose 2D dariniuose gali padidėti iki 4 kartų.

Priemaišų, esančių begalinio gylio kvantinio šulinio centre ir prie krašto, jonizacijos energijos priklausomybė nuo kvantinio šulinio pločio pavaizduota 9 (a) paveiksle [83]. Priemaišų jonizacijos energijos normuotos į jų jonizacijos energijas tūriniame kristale, o kvantinių šulinių plotis  $L_W$  normuotas į priemaišų Bohr spindulį  $a_0$  tūriniame kristale. Priemaišų jonizacijos energijų  $E_I(L_W, z)/E_I(L_W, 0)$  priklausomybė nuo jos padėties įvairaus pločio begalinio gylio kvantiniuose šuliniuose pavaizduota 9 (b) paveiksle [83]. Kaip matyti,

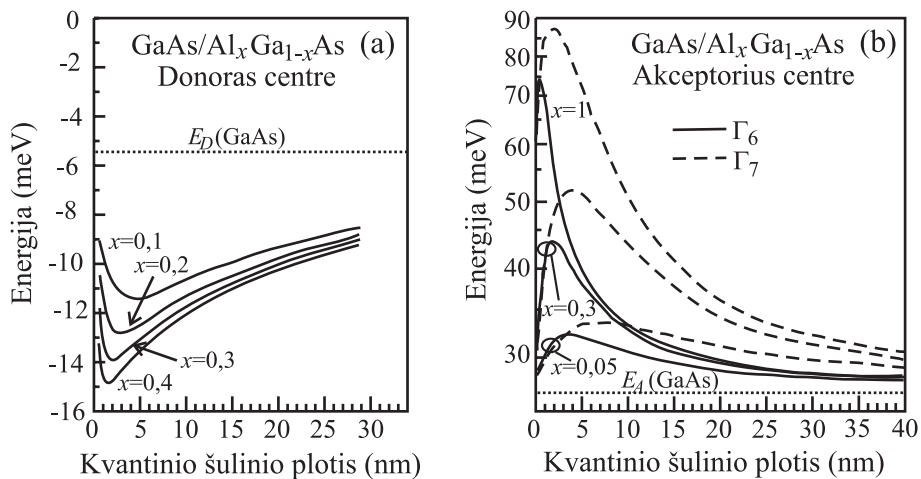


**9 pav. (a)** priemaišų, esančių kvantinio šulinio centre (\*) ir prie krašto (+), jonizacijos energijų priklausomybės nuo šulinio pločio; **(b)** priemaišų jonizacijos energijų  $E_I(L_W, z)/E_I(L_W, 0)$  priklausomybė nuo jos padėties įvairaus pločio begalinio gylio kvantiniuose šuliniuose [83].

skirtingo pločio kvantiniuose šuliniuose jonizacijos energija nuo priemaišos padėties kinta nevienodai. Mažinant kvantinio šulinio plotį, mažėja skirtumas tarp jonizacijos energijų priemaišų esančių kvantinio šulinio centre ir prie krašto. Paminėsime, kad pritaikius vandenilio tipo modelį tūriniame GaAs kristale Rydberg energija donorams  $Ry = 5,8$  meV ir akceptoriams 26 meV. Tuomet Bohr spinduliai atitinkamai donorams yra apie  $a_0 = 10$  nm, o akceptoriams apie 2 nm. Dėl mažesnio Bohr spindulio akceptoriams jonizacijos energijos atitinkamas kitimas nuo priemaišos padėties pasireiškia siauresniuose kvantiniuose šuliniuose nei donorinėms priemaišoms.

Sekliųjų priemaišų realiuose kvantiniuose šuliniuose jonizacijos energija nepadidėja keturis kartus, nes kvantinių šulinių barjerai yra baigtinio aukščio ir krūvininkų banginės funkcijos išsiskverbia į barjerus.

Baigtinio gylio GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantinio šulinio centre esančių donorų [84] ir akseptorių [89] jonizacijos energijų priklausomybės nuo šulinio pločio, esant įvairioms barjerų sudėtims  $x$ , pavaizduotos atitinkamai 10 (a, b) paveiksluose. Čia, skaičiuojant donorų jonizacijos energijas [84], buvo naudojama apie 9 % mažesnė ( $Ry = 5,3$  meV) Rydberg energija tūriniame GaAs kristale nei dabar priimta ( $Ry = 5,8$  meV). Gautas geras teorijos ir eksperimento atitikimas akseptoriams [89, 94] ir, pakoregavus Rydberg energiją, donorams [95].



**10 pav.** GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantinių šulinių centre esančių (a) donorinių [84] ir (b) akseptorinių priemaišų teorinės jonizacijos energijos [89], kai įvairios barjerų sudėtys  $x$ . Taškinės linijos žymi priemaišų jonizacijos energijas tūriniame GaAs.  $\Gamma_6$  yra energija iki sunkiųjų skylių pojuosčio, o  $\Gamma_7$  – iki lengvųjų skylių pojuosčio.

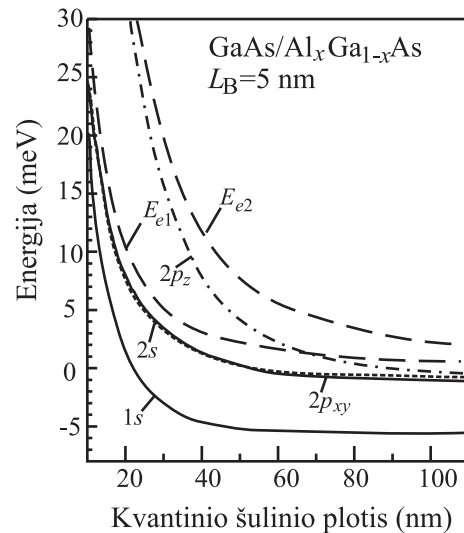
#### 1.4.5 Priemaišų simetrija ir spektras

Priemaišų energijos spektras kvantiniuose šuliniuose yra sudėtingesnis negu tūriniuose kristaluose. Jam aprašyti nebetinka vandenilio tipo sferinės simetrijos modelis. Priemaišų energijos spektras kvantiniuose šuliniuose priklauso ne tik nuo priemaišos vietos kvantiniame šulinyje, bet ir nuo

kvantinio šulinio auginimo [001], [110] ar [111] krypties. Supergardelėje spektras gali priklausyti net ir nuo supergardenę sudarančių atomų sluoksnių skaičiaus [96]. Priemaišų GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantiniuose šuliniuose negalime charakterizuoti kubine  $T_d$  simetrija. Jei atomas yra kvantinio šulinio centre, tai išauginus darinį [001] kryptimi, atomo vieta charakterizuojama  $D_{2d}$  simetrija. Tą patį galima pasakyti ir apie priemaišas, kurios pakeičia tikruosius gardelės atomus. Kuomet priemaiša yra ne kvantinio šulinio centre, tai ji charakterizuojama  $C_{2v}$  simetrija, nors kvantinis šulinys užaugintas [001] kryptimi [97].

Panagrinėsime *donorines priemaišas*. Jų nagrinėjimas yra paprastesnis. Tegul donorinės priemaišos įterptos [001] kryptimi užauginto GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantinio šulinio centre. Sekliųjų donorinių priemaišų GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantiniuose šuliniuose energines būsenas, kaip tūrinio kristalo atveju, galime nagrinėti sprendami vandenilio tipo uždavinį su Coulomb potencialu. Tik šiuo atveju reikia užduoti papildomas kraštines sąlygas dėl darinio baigtinio pločio. Sužadinti donoriniai lygmenys tūriniame GaAs kristale yra išsigimę ir išsigimimo skaičius priklauso nuo

pagrindinio kvantinio skaičiaus  $n$ . Tūriniame kristale  $n = 2$  lygmuo yra keturiskart išsigimęs: vieno  $2s$  lygmens ir trijų  $2p$  lygmenų energijos sutampa. Kvantinio šulinio donorinei priemaišai  $n = 2$  lygmens išsigimimas iš dalies pasinaikina ir lygmuo suskyla į  $2s$ , bei  $2p_x$ ,  $2p_y$ ,  $2p_z$  [88]. Šis suskilimas buvo stebėtas eksperimentiškai žadinimo FL spektruose [99] ir tolimosios infraraudonosios srities optiniuose [98] ir magneto-optiniuose matavimuose [100].



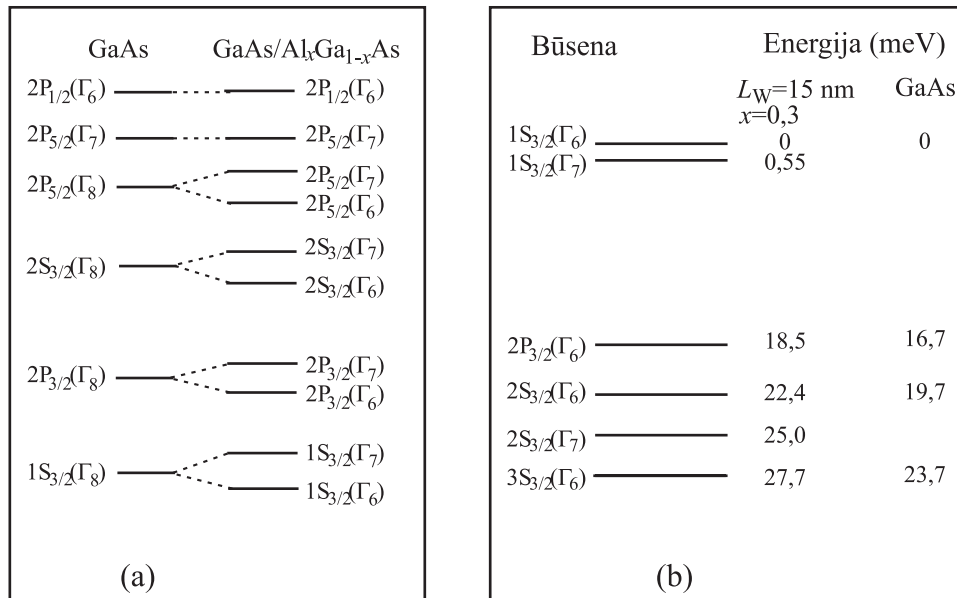
**11 pav.** GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantinio šulinio elektronų lygmenų energijų  $E_{e1}$  ir  $E_{e2}$  bei donorų  $1s$  ir  $2s$ ,  $2p_{x,y}$ ,  $2p_z$  lygmenų energijų priklausomybė nuo kvantinio šulinio pločio [98].

Donorų  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p_x$ ,  $2p_y$ ,  $2p_z$  lygmenų energijų priklausomybė nuo GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantinio šulinio pločio pateikta 11 paveiksle [98]. Jame  $2p_{x,y}$  žymi lygmenis  $2p_x$  ir  $2p_y$ . Galime pastebėti, kad  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p_{x,y}$  donorines būsenas atitinkančios energijos yra žemiau kvantinio šulinio elektronų pirmojo lygmens energijos  $E_{e1}$ . Donorų būsenas  $2s$ ,  $2p_{x,y}$  atitinkančios energijos yra artimos  $E_{2s} \approx E_{2p_{x,y}}$ .  $2p_z$  būsenos energija yra aukščiau pirmojo lygmens energijos  $E_{e1}$  ir artima antrojo lygmens energijai  $E_{e2}$ . Labai platiems kvantiniams šuliniams donorų  $2p_z$  būsenos energija yra žemiau pirmojo lygmens energijos  $E_{e1}$ . Tai yra artėjama prie tūrinio kristalo atvejo.

*Akceptorinių priemaišų* energijos spektras kvantiniuose šuliniuose yra žymiai sudėtingesnis nei donorinių priemaišų. Net tūrinuose kristaluose šis klausimas yra gana sudėtingas. Tai yra susiję su tuo, kad kubinės simetrijos puslaidininkių valentinė juosta yra išsigimusi. Pojuosčių izoenerginiai paviršiai nėra taisyklingos sferos. Tačiau kvantiniuose šuliniuose išsigimimas pasinaikina ir taip susikuria sunkiųjų ir lengvųjų skylių pojuosčiai.

Jei akceptorius yra  $[001]$  kryptimi užauginto kvantinio šulinio centre, tuomet tūrinio kristalo akceptoriaus pagrindinė  $\Gamma_8$  būseną skyla į  $\Gamma_6$  ir  $\Gamma_7$  būsenas [89, 101]. Tikėtina akceptorinės Be priemaišos, esančios GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantinio šulinio centre, energinių lygmenų skilimo schema pavaizduota 12 (a) paveiksle [101]. Akceptorinė būseną  $\Gamma_6$  yra susijusi su sunkiųjų skylių, o  $\Gamma_7$  yra labiau susijusi su lengvųjų skylių valentinės juostos pojuostėmis. Todėl teoriškai nagrinėjamos kartu sunkiųjų ir lengvųjų skylių akceptorinės būsenos (žr 10 (b) pav.).

Eksperimentiškai nustatytas  $L_w = 15$  nm pločio GaAs/Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As kartotinių kvantinių šulinių akceptorinių Be priemaišų spektras pavaizduotas 12 (b) paveiksle [102]. Priemaišos buvo įterptos į kvantinių šulinių vidurį ir užėmė 20 % kvantinio šulinio pločio. Kaip matyti iš spektro, pagrindinio lygmens skilimas yra labai mažas. Tai yra atstumas tarp  $1S_{3/2}(\Gamma_6)$  ir  $1S_{3/2}(\Gamma_7)$  būsenų lygmenų yra apie 0,55 meV, kai  $L_w = 15$  nm. Šis suskilimas šiek tiek



**12 pav.** Akceptorinės Be priemaišos, esančios GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantinio šulinio centre, (a) energinių lygmenų skilimo schema [101] (b) eksperimentiškai nustatytas spektras, kai  $L_w = 15\text{ nm}$  ir  $x = 0,3$  [102].

padidėja siaurinant kvantinius šulinius [103]. Pagrindinio lygmens būsenos  $1S_{3/2}(\Gamma_6)$  ir  $1S_{3/2}(\Gamma_7)$  yra stipriai sumaišytos – apie 50/50 % [102]. Skirstymas į sunkiųjų ir lengvųjų skylių būsenas geriau tinka sužadintiems energijos lygmenims, nes jų būsenos yra labiau atsiskyrusios ir grynesnės. Tačiau ir pagrindinius akceptorius energijos lygmenis paprastumo dėlei tiesiog vadina  $1S_{3/2}(\Gamma_6)$  sunkiųjų skylių, o  $1S_{3/2}(\Gamma_7)$  – lengvųjų skylių lygmenimis. Nustatyta, kad sunkiųjų skylių lygmenys duoda svaresnį įnašą į optinius šuolius, jų linijos yra žymiai intensyvesnės. Todėl eksperimentiškai stebimos linijos dažniausiai siejamos su sunkiųjų skylių akceptorinėmis būsenomis.

Tiriant GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantiniuose šuliniuose priemaišų savybes nuo magnetinių laukų [87, 90] buvo parodyta, kad magnetinis laukas didina priemaišų jonizacijos energijas. Priemaišų jonizacijos energijos pokytis dėl magnetinio lauko lėtai didėja mažinant kvantinio šulinio plotį. Kvantinių šulinių auginimo kryptimi pridėtas elektrinis laukas nevienodai veikia priemaišų, esančių kvantinio šulinio centre ir krašte, jonizacijos energijas. Šis poveikis didesnis plačiuose kvantiniuose šuliniuose. Centre esančių priemaišų

jonizacijos energijos mažėja didinant elektrinio lauko stiprį. Tuo tarpu viename krašte esančių priemaišų jonizacijos energija didėja, o kitame krašte – mažėja [104, 90]. Skirtinguose kraštuose esančių priemaišų jonizacijos energijų pokytis stipriuose elektriniuose laukuose nevienodas: padidėja daugiau negu sumažėja.

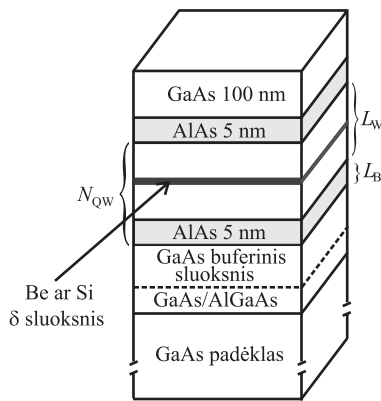
Vienaašis slėgis  $z$  kryptimi didina akceptorinių sunkiųjų skylių jonizacijos energiją, bet lengvųjų skylių – mažina [90]. Tai suteikia galimybę detaliau tirti lengvųjų skylių akceptorinio būsenas.

Priemaišos labiau ištirtos GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantiniuose šuliniuose iki sudėties  $x \approx 0,4$ . Tačiau priemaišų eksperimentinių tyrimų rezultatų I-ojo tipo GaAs/AlAs kvantiniuose šuliniuose yra nedaug. Nėra tirta priemaišų spinduliuotės sąveika su fononais, akceptorinių priemaišų tankio įtaka spinduliuotei. Tad išsikėlėme tikslą ištirti Be akceptorinių ir Si donorinių priemaišų įtaką  $\delta$ -legiruotų GaAs/AlAs kvantinių šulinių fotoluminescencijos savybėms.

## 2 BANDINIAI IR MATAVIMO TECHNIKA

### 2.1 Bandiniai

Tyrimams buvo naudojami nelegiruoti ir  $\delta$  legiruoti akceptorinėmis Be arba donorinėmis Si priemaišomis kartotiniai GaAs/AlAs kvantiniai šuliniai. Bandiniai buvo užauginti molekulinų pluoštelių epitaksijos būdu Jungtinės Karalystės Sheffield (bandiniai su raide S) ir Leeds (bandiniai su raide L) universitetų elektronikos ir elektrotechnikos skyrių laboratorijose naudojant V80H įrenginius. Bandinių sandara pavaizduota 13 paveiksle. Kvantiniai



13 pav. Bandinių sandara

šuliniai buvo užauginti ant izoliacinių GaAs padėklų [001] kryptimi prieš tai užauginus 500–1000 nm buferinį grynojo GaAs sluoksnį. Leeds universiteto laboratorijos bandiniuose prieš buferinį sluoksnį dar buvo užauginti 100 nm grynojo GaAs ir 100 nm  $\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{As}$  sluoksniai. Kartotiniai GaAs šuliniai, kurių plotis  $L_W = 5, 10, 15, 20$  nm, atskirti

5 nm pločio AlAs barjeriais. Kvantinių šulinių pasikartojimas siekė nuo 40 iki 200 kartų. Detalesnė informacija apie bandinius pateikta 2 lentelėje. Priemaišomis legiruotuose bandiniuose į kiekvieno kvantinio šulinio vidurį papildomai įterptas siauras apie 2 nm storio Be akceptorinių arba Si donorinių priemaišų sluoksnis, kurį vadiname  $\delta$  legiravimo sluoksniu. Silicis yra amfoterinė priemaiša, todėl juo legiruotiems bandiniams buvo parinkta atitinkama auginimo temperatūra, kad kristale priemaišos maksimaliai virstų donorinėmis. Ant kvantinių šulinių viršaus buvo papildomai užaugintas 100 nm storio grynojo GaAs sluoksnis, kuris apsaugo kvantinius šulinius nuo oksidacijos ir atmosferos poveikio.

Taip pat, kai kuriems lyginamiesiems matavimams atlikti, buvo išaugintas 5  $\mu\text{m}$  storio tolygiai beriliu  $N_{\text{Be}} = 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  legiruotas tūrinio GaAs sluoksnis (S1796) ir 15 nm pločio priemaišomis nelegiruoti kartotiniai kvantiniai šuliniai (L80).

**2 lentelė.** Bandinių charakteristikos:  $L_w$  – GaAs kvantinio šulinio plotis,  $N$  –  $\delta$ -legiravimo priemaišų tankis,  $T_s$  – padėklo temperatūra auginimo metu,  $N_{\text{QW}}$  – kartotinių kvantinių šulinių skaičius bandinyje,  $L_B$  – AlAs barjero plotis.

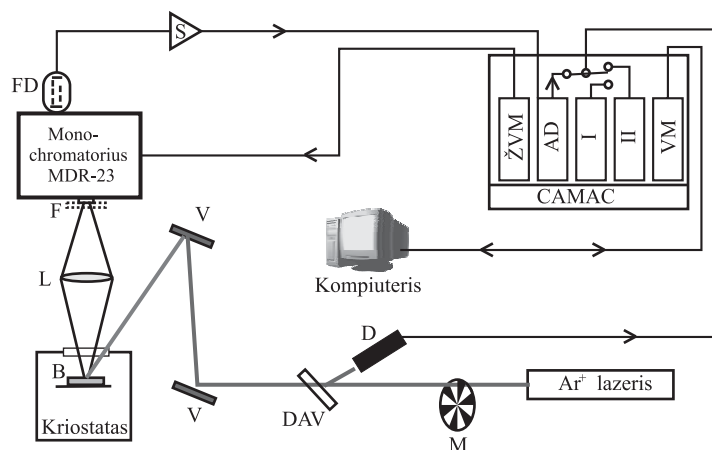
Bandinys	$L_w$ , nm	Priemaiša	$N$ , $\text{cm}^{-2}$	$T_s$ , $^{\circ}\text{C}$	$N_{\text{QW}}$	$L_B$ , nm	Buferio storis, nm
<b><i>p</i>-tipo bandiniai</b>							
S1807	20	Be	$5 \cdot 10^{10}$	550	100	5	500
S1392	20	Be	$2,5 \cdot 10^{12}$	540	40	5	500
S1303	15	Be	$2,5 \cdot 10^{12}$	540	50	5	500
S1794	10	Be	$5 \cdot 10^{10}$	550	200	5	500
S2068	5	Be	$5 \cdot 10^{10}$	550	300	5	500
S2071	5	Be	$5 \cdot 10^{12}$	550	300	5	500
L152	15	Be	$2,7 \cdot 10^{11}$	646	60	5	1000
L151	15	Be	$2,7 \cdot 10^{12}$	647	60	5	1000
L153	15	Be	$2,7 \cdot 10^{13}$	642	60	5	1000
L154	15	Be	$5,3 \cdot 10^{13}$	644	60	5	1000
<b><i>n</i>-tipo bandiniai</b>							
L29	20	Si	$4 \cdot 10^9$	570	40	5	1000
L44	20	Si	$1 \cdot 10^{10}$	595	40	5	550
L30	20	Si	$1,4 \cdot 10^{11}$	570	40	5	1000
L45	20	Si	$1,4 \cdot 10^{11}$	595	40	5	550
L80	15	-	nelegiruotas	615	40	5	1000
L78	15	Si	$1,4 \cdot 10^{11}$	615	40	5	1000
L79	15	Si	$4 \cdot 10^{11}$	615	40	5	1000
<b>Tūrinis</b>							
S1796	5 $\mu\text{m}$ GaAs sluoksnis	Be	$2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ tolygiai	550	-	-	500



Sheffield universiteto laboratorijoje bandinių sluoksniai auginti naudojant stechiometrinę žemų temperatūrų auginimo technologiją, kuri užtikrina optinių medžiagų aukštą kokybę net ir santykinai žemoje auginimo temperatūroje. Todėl sluoksniai buvo auginti be pertraukimų 550 °C temperatūroje, o tai garantavo labai mažą Be priemaišų difuziją sluoksniuose.

## 2.2 Nuostoviosios fotoluminescencijos tyrimo schema

Nuostoviosios fotoluminescencijos matavimams buvo naudojamas automatizuotas fotonų skaičiavimo su sinchroniniu detektavimu metodas, kuris leidžia operatyviai eliminuoti matavimo metu kintančią tamsinę šviesą (fona) ir fotodaugintuvo sukeltus triukšmus. Eksperimento schema parodyta 14 paveiksle.



**14 pav.** Eksperimento blokinė schema. M – mechaninis šviesos pertraukiklis, DAV – dalinai atspindintis veidrodis (atspindi 10 %), D – fotodiodas, V – veidrodžiai, B – bandinys, L – lęšis, F – optinis šviesos filtras, FD – fotodaugintuvas, S – nanosekundinis stiprintuvas, ŽVM – žingsninio variklio valdymo modulis, AD – amplitudinis diskriminatorius, I, II – pirmasis ir antrasis skaitikliai, VM – valdymo modulis.

Fotoluminescencijos žadinimui naudojama tiesinės poliarizacijos ir daugiau kaip 90 % grynumo TEM<sub>00</sub> modos 20–300 mW galios argono jonų lazerio spinduliuotė. Lazerio 0,8 mm skersmens spindulys nedideliu 15–20° kampu į bandinio paviršių nukreipiamas veidrodžiais. Pagrindinės lazerio spinduliuotės linijos yra 458–515 nm bangų ilgio intervale, iš kurių intensyviausios yra 488 ir 514,5 nm linijos. Tai atitinka 2,4–2,7 eV fotonų

energiją. Tad, optiškai žadinant medžiagas, kurių draudžiamųjų energijų tarpas  $E_g < 2,7$  eV (pvz. GaAs,  $Al_xGa_{1-x}As$  dariniai), galime stebėti laisvųjų elektronų ir skylių, eksitonų bei su donorais, akceptoriais ar defektais susijusių spinduliuočių spektrus.

Bandiniai klijuojami BF-2 klijais prie laikiklio ir talpinami į kriostatą su kvarco stiklo langu. Bandiniams atšaldyti iki 77 K temperatūros buvo naudojamas skystasis azotas. Iš kriostato vakuuminis siurbliu buvo išsiurbiamas oras, kad ant bandinių nesusidarytų vandens lašelių. Vakuumo lygis matuojamas termoporiniu vakuumetru. Patobulinus tyrimo techniką, naudojome Janis firmos uždarojo ciklo helio optinį kriostatą RDK-408D2, kuriame bandiniai atšaldomi iki skystojo helio temperatūros  $\sim 3,6$  K. Pasinaudojus kaitinimo krosnelės valdymo įrenginiu galima temperatūrą keisti nuo 3,6 K iki 300 K.

Surinkta nuo bandinio paviršiaus šviesa per lęšį nukreipiama į 60 cm gardelinio monochromatoriaus MDR-23 įėjimo langelį su optiniu filtru F. Filtras praleisdavo 600–1000 nm ilgio šviesos bangas ir tuo pačiu nepraleisdavo nuo bandinio atsispindėjusios lazerio šviesos. Šiame bangų ilgio intervale monochromatorius išskleisdavo norimo bangos ilgio šviesą, kuri patekdavo į skystojo azoto garais šaldomą GaAs fotodaugintuvą FEU-157-1. Fotodaugintuvas dirbo fotonų skaičiavimo režimu. Patekę į jį fotonai buvo paverčiami nanosekundinės trukmės elektros srovės impulsais. Šie impulsai buvo stiprinami nanosekundiniu stiprintuvu ir siunčiami į amplitudinį diskriminatorių, kuris pašalindavo mažos amplitudės impulsus, kurie yra susiję su fotodaugintuvo tamsiniais triukšmais. Papildomai, fonui ir tamsiniams impulsams pašalinti, lazerio spindulys buvo moduluojamas 500 Hz dažnio mechaniniu pertraukikliu M, kuris vienodais laiko tarpais praleisdavo arba nepraleisdavo lazerio spindulį. Kai pertraukiklis atdaras, ir lazerio šviesa patenka į bandinį, iš fotodaugintuvo ateinantys impulsai sumuojami I skaitiklyje, kuris yra viename iš kompiuteriu valdomo CAMAC stendo modulių. Kai pertraukiklis uždaras, tuomet sumuojami impulsai II skaitiklyje.

Dešimt procentų lazerio šviesos buvo nukreipiama į fotodiodą D, kuris suformuodavo signalą skaitikliams valdyti. Baigus matavimo ciklą, iš I skaitiklio rodmenų atėmę II skaitiklio rodmenis, gauname skaičių impulsų, kuriuos sukėlė fotonai, atsiradę dėl žadinimo lazeriu. Nubraižę fotonų skaičiaus priklausomybę nuo jų energijos arba bangos ilgio, gauname fotoluminescencijos spektrą.

Sistemos registravimo riba yra apie 5 imp/s arba, kitaip tariant, 5 fotonai per sekundę. Matavimo metu buvo atidaromas monochromatoriaus plyšys  $d = 0,01\text{--}1,2$  mm, priklausomai nuo signalo dydžio ir reikalingo spektro tikslumo. Naudotos gardelės skiriamoji geba yra 1,3 nm/mm, o monochromatoriumi pasiekiami maksimali skiriamoji geba 0,013 nm. Tuomet, esant matavimams netoli  $\lambda = 800$  nm, pasiekiami maksimali skiriamoji geba 0,025 meV.

Žadinančios šviesos intensyvumas buvo papildomai didinamas fokusuojant lęšiu lazerio spindulį ant bandinio paviršiaus, o susilpninti žadinančios šviesos intensyvumą naudojome neutralius optinius filtrus NS-3 arba NS-10. Tokiu būdu žadinančios šviesos intensyvumą galėjome keisti nuo 2 mW/cm<sup>2</sup> iki 100 W/cm<sup>2</sup>.

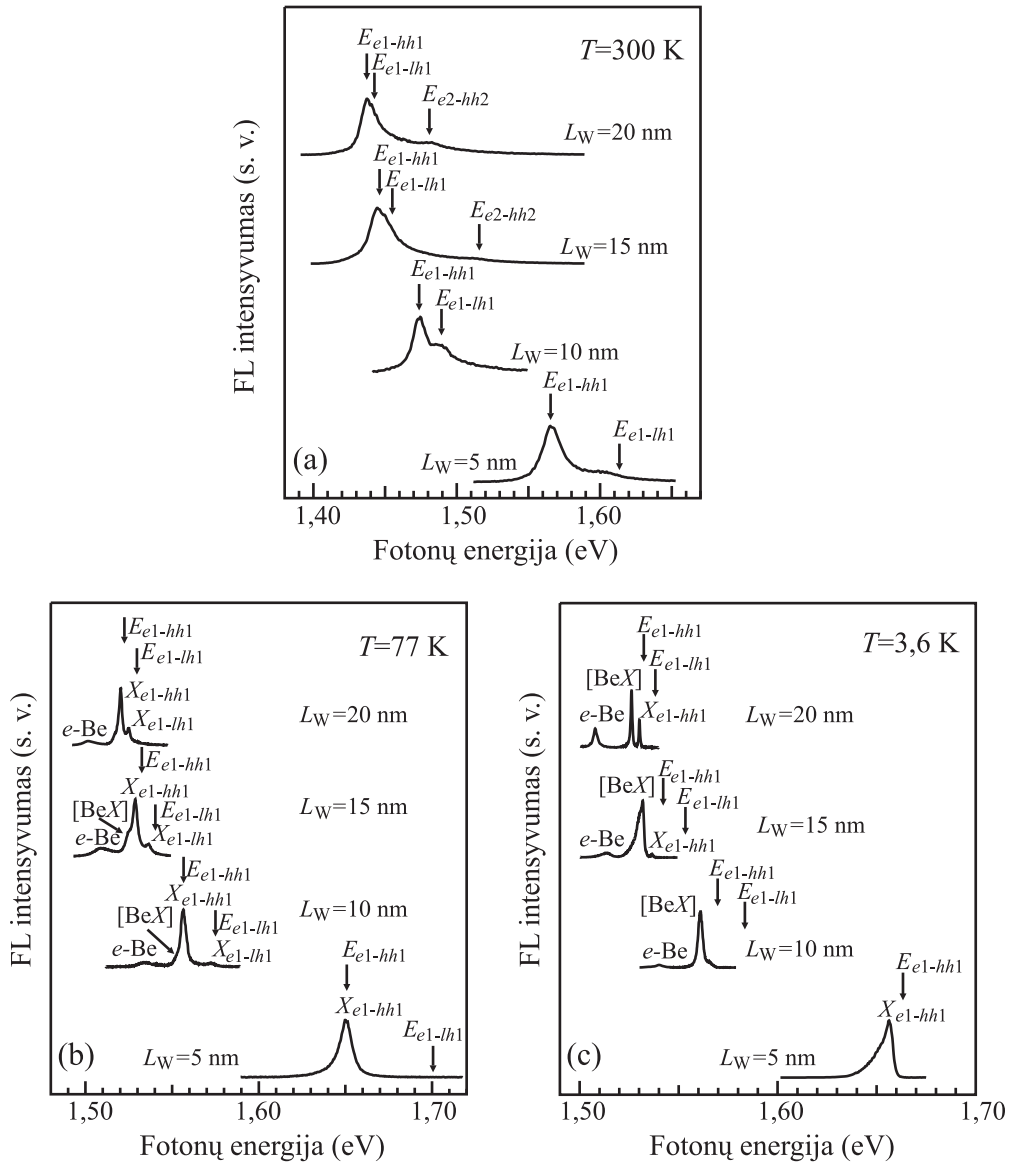
### 3 SILPNAI $\delta$ LEGIRUOTŲ GaAs/AlAs KVANTINIŲ ŠULINIŲ FOTOLIUMINESCENCIJOS SPEKTRŲ TYRIMAS

Įterpus į kvantinį šulinį nedidelį kiekį priemaišų, jas galima nagrinėti kaip tarpusavyje nesąveikaujančias. Tokių silpnai  $\delta$  legiruotų GaAs/AlAs kvantinių šulinių fotoluminescencijos spektruose galima išskirti savitą ir priemaišinę spinduliuotes. Šis skyrius skirtas detalesnei šių spinduliuočių analizei. Panagrinėsime FL spektrų nuo skystojo helio iki kambario temperatūros ypatumus, priemaišų įtaką spinduliuotei ir priemaišinės spinduliuotės linijos pavidalą. Savitosios ir priemaišinės spinduliuočių linijų pavidalui aprašyti panaudosime trupmeninės dimensijos erdvės (TDE) modelį. Susiję rezultatai paskelbti [S1], [S2] darbuose.

#### **3.1 Eksperimentiniai fotoluminescencijos spektrų rezultatai**

Silpnai  $\delta$  legiruotų GaAs/AlAs kvantinių šulinių fotoluminescencijos spektrų tyrimai atlikti su bandiniais, kuriuose buvo įterptos  $p$ -tipo Be priemaišos arba  $n$ -tipo – Si priemaišos. Detalesniems tyrimams pasirinkti  $p$ -tipo kartotiniai GaAs/AlAs kvantiniai šuliniai, kurių plotis  $L_w = 5, 10, 15$  ir  $20$  nm, o berilio priemaišų tankis juose siekė  $N_{Be} = 5 \cdot 10^{10}$  arba  $2,5 \cdot 10^{12}$  cm<sup>-2</sup>. Silpnai Be legiruotų bandinių FL spektrai, esant trims skirtingoms temperatūroms, pateikti 15 paveiksle.

Esant kambario temperatūrai (15 (a) pav.), platesniųjų kvantinių šulinių sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitonų smailės yra susiliejusios, tačiau stebimos aukštesniųjų lygmenų sunkiųjų skylių eksitoninės smailės. Dėl gardelės šiluminių svyravimų iš dalies yra užpildomos ir aukštesniųjų lygmenų eksitoninės būsenos. Mažėjant kvantinio šulinio pločiui didėja atstumai tarp sunkiųjų ir lengvųjų skylių energinių lygmenų, tuo pačiu, atstumai tarp sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitoninių smailių. Todėl 10 bei 5 nm pločio kvantinių šulinių FL spektruose sunkiųjų ir lengvųjų skylių smailės stebime atsiskyrusias. Tai galima suprasti iš gerai žinomo klasikinio uždavinio (dalelė



**15 pav.** Be  $\delta$ -legiruoatų GaAs/AlAs kartotinių kvantinių šulinių, kurių plotis  $L_W = 5, 10, 20$  nm ir priemaišų tankis  $N_{Be} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  bei  $L_W = 15$  nm ir  $N_{Be} = 2,5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , savitosios FL spinduliuotės spektrai, esant (a) kambario, (b) skystojo azoto ir (c) 3,6 K temperatūroms. Spektrai yra normuoti ir perstumti vertikaliajoje skalėje. Rodyklėmis paveiksle pažymėti teoriškai apskaičiuoti energijų atstumai:  $E_{e1-hh1}$  – tarp pirmojo elektronų ir pirmojo sunkiųjų skylių lygmenų,  $E_{e2-hh2}$  – tarp antrojo elektronų ir antrojo sunkiųjų skylių lygmenų,  $E_{e1-lh1}$  – tarp pirmojo elektronų ir pirmojo lengvųjų skylių lygmenų. Simboliai  $X_{e1-hh1}$ ,  $X_{e1-lh1}$  žymi sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitoninę spinduliuotę,  $[BeX]$  – surištojo eksitono su Be akceptoriumi spinduliuotę,  $e\text{-Be}$  – laisvojo elektrono rekombinaciją su Be akceptoriumi.

potencinėje duobėje) išvadų, kad siaurėjant duobės pločiui dalelės energijos lygmenys kyla aukštyr ir didėja atstumas tarp jų. Taip pat lygmenų postūmis

priklauso nuo krūvininko efektinės masės. Kuo mažesnė masė, tuo didesnis lygmenų postūmis. Viso to pasekmėje siauriems kvantiniams šuliniams padidėja atstumas tarp sunkiųjų ir lengvųjų skylių lygmenų. Rodyklėmis 15 pav. pažymėti apskaičiuoti  $E_{e1-hh1}$ ,  $E_{e1-lh1}$ ,  $E_{e2-hh2}$  energijų skirtumai tarp pirmojo elektronų ir pirmojo sunkiųjų ar lengvųjų skylių lygmenų bei antrojo elektronų ir antrojo sunkiųjų skylių lygmenų. Stebimų smailių maksimumai yra pasislinkę per eksitono ryšio energijos dydį į mažesniųjų energijų pusę nuo kvantinio šulinio draudžiamosios energijos tarpo vertės. Todėl šios smailės yra siejamos su eksitonine spinduliuote.

Energinis atstumas tarp sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitonų pagrindinių būsenų lygus

$$E(X_{lh}) - E(X_{hh}) = [E_{e1-lh1} - E_b(X_{lh})] - [E_{e1-hh1} - E_b(X_{hh})]; \quad (3.1)$$

čia  $E_b(X_{lh})$  ir  $E_b(X_{hh})$  yra lengvųjų ir sunkiųjų skylių eksitonų ryšio energijos, kurių vertės yra apskaičiuotos [32] darbe ir pateiktos 7 pav. Kvantinių šulinių draudžiamųjų energijų tarpų vertės, esant skystojo azoto temperatūrai, ir pagal (3.1) lygtį rasti energiniai atstumai pateikti 3 lentelėje. Palyginimui taip pat pateiktos iš silpnai legiruotų bandinių FL spektrų rastos eksperimentinės eksitoninių smailių padėtys skystojo azoto temperatūroje ir energiniai atstumai tarp sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitonų.

**3 lentelė.** Sunkiųjų skylių eksitonų  $E_b(X_{hh})$  ir lengvųjų skylių eksitonų  $E_b(X_{lh})$  ryšio energijos [32], kvantinių šulinių sunkiųjų (lengvųjų) skylių draudžiamųjų energijų tarpų vertės  $E_{e1-hh1}$  ( $E_{e1-lh1}$ ) 77 K temperatūroje, energiniai atstumai tarp sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitonų smailių  $E(X_{lh})-E(X_{hh})$ , eksperimentinės eksitoninių smailių maksimumų padėtys  $E(X_{hh})$  ir  $E(X_{lh})$  77 K temperatūroje.

$L_w$ , nm	Teorija					Eksperimentas		
	$E_b(X_{hh})$ , meV	$E_b(X_{lh})$ , meV	$E_{e1-hh1}$ , eV	$E_{e1-lh1}$ , eV	$E(X_{lh})-E(X_{hh})$ , meV	$E(X_{hh})$ , eV	$E(X_{lh})$ , eV	$E(X_{lh})-E(X_{hh})$ , meV
5	15,8	21,5	1,6508	1,7084	51,9	1,6469	1,683	36,1
10	11,6	15	1,5546	1,5737	15,7	1,5505	1,5662	15,7
15	9,7	11,9	1,5309	1,5408	7,7	1,5287	1,5363	7,6
20	8,3	9,8	1,5214	1,5275	4,6	1,5182	1,5229	4,7

Teoriniai ir eksperimentiniai energiniai atstumai tarp sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitonų labai gerai sutampa platiems GaAs/AlAs kvantiniams šuliniams. Tačiau 5 nm pločio kvantiniams šuliniams gautos vertės skiriasi apie 1,4 karto. Tai gali būti susiję su tuo, kad energijos lygmenų padėčiai apskaičiuoti neatsižvelgėme į elektronų efektinės masės priklausomybę nuo energijos. Ji gali būti svarbi esant siauriems kvantiniams šuliniams.

Paminėsime, kad krūvininkų energinės būsenos buvo rastos sprendžiant nuostoviąsias Schrödinger lygtis atskirai kiekvienai GaAs/AlAs kvantinio šulinio juostai. Skaičiavimuose buvo atsižvelgta į krūvininkų tikimybę įsiskverbti į barjerą dėl jo baigtinio aukščio, naudotos skirtingos krūvininkų efektinės masės barjere ir šulinyje. Schrödinger lygties sprendiniai rasti skaitmeniškai ir grafiškai sprendžiant transcendentinių lygčių sistemą (1.15). Skaičiavimams reikalingi juostų trūkiai  $\Delta E_{c,v}$  rasti pagal (1.11) ir (1.12) lygtis, kur GaAs ir AlAs draudžiamųjų energijų tarpai, priklausantys nuo temperatūros  $T$ , atitinkamai lygūs [19]:

$$E_g(\text{GaAs}) = 1,519 + \frac{5,405 \cdot 10^{-4} T^2}{T + 204}, \quad (3.2)$$

$$E_g(\text{AlAs}) = 3,099 + \frac{8,85 \cdot 10^{-4} T^2}{T + 530}. \quad (3.3)$$

Juostų trūkio parametro vertė yra  $Q = 0,6$ . Valentinės juostos atveju, naudotos sunkiųjų ir lengvųjų skylių efektines masės [001] kryptimi, kurios rastos pagal (1.4) lygtis. Skaičiavimams naudoti Luttinger parametrai pateikti 1 lentelėje. GaAs ir AlAs elektronų efektinės masės atitinkamai lygios  $0,0665m_0$  ir  $0,124m_0$ .

Žemos temperatūros FL spektruose stebimos dvi papildomos smailės. Mažiausios energijos smailė pažymėta  $e\text{-Be}$  ir susieta su laisvųjų elektronų ir Be akceptoriais surištųjų skylių rekombinacija. Detaliau šią rekombinaciją panagrinsime 3.3 poskyryje. Kita smailė greta laisvojo eksitono yra surištojo eksitono su Be priemaiša spinduliuotė pažymėta  $[\text{BeX}]$  simboliu (žr. 15 pav. (b,

c)). Surištojo eksitono ryšio energiją galime rasti pagal lygtį

$$E_b[\text{BeX}] = E(X_{e1-hh1}) - E[\text{BeX}], \quad (3.4)$$

čia  $E(X_{e1-hh1})$  yra sunkiųjų skylių eksitono smailės energinė padėtis, o  $E[\text{BeX}]$  – surištojo eksitono smailės energinė padėtis. Rastos su akceptoriumi surištojo eksitono ryšio energijos pateiktos 4 lentelėje. Jos yra artimos kitų autorių gautiems eksperimentiniams rezultatams GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantiniuose šuliniuose, kai  $x < 0,5$ . Surištojo eksitono ryšio energijos verčių,  $L_w = 20$  nm pločio kvantiniuose šuliniuose, didesnis išsibarstymas yra daugiau susijęs su nevienodu priemaišų tankiu juose.

**4 lentelė.** Su akceptorinėmis ir donarinėmis priemaišomis surišųjų eksitonų [BeX] ir [SiX] ryšio energijos kvantiniuose šuliniuose

$L_w$ , nm	$E_b[\text{BeX}]$ , meV		Haynes taisyklė	$E_b[\text{SiX}]$ , meV		Haynes taisyklė
	Mūsų eksp. GaAs/AlAs	Eksp. GaAs/ Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As $x < 0,5$	$E_b[\text{BeX}] = 0,133E_{\text{Be}}$ meV <sup>a</sup>	Mūsų eksp. GaAs/AlAs	Eksp. GaAs/ Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As $x < 0,4$	$E_b[\text{SiX}] = 0,185E_{\text{Si}}$ meV
5	5,5–5,8	6,5 <sup>a</sup> ~6 <sup>b</sup>	6	...	...	2,96
10	3,9–4	4,1–4,2 <sup>c</sup> ~4,1 <sup>b</sup>	4,5	...	~2,25 <sup>d,e</sup>	2,44
15	4,2–4,5	~3,9 <sup>b</sup>	4,1	1,7–2,4	~1,9 <sup>d,e</sup>	2,11
20	3,6–4,1	...	3,9	1,9	~1,75 <sup>d,e</sup>	1,89
GaAs	...	2,9 <sup>f</sup>	3,7		1,2 <sup>f</sup>	1,08

<sup>a</sup> [105], <sup>b</sup> [106], <sup>c</sup> [55], <sup>d</sup> [107], <sup>e</sup> [108], <sup>f</sup> [109].

Nagrinėdamas su donoru surištajį eksitoną silicio kristale, Haynes [110] nustatė empirinę su donoru surištojo eksitono ryšio energijos priklausomybę nuo donoro jonizacijos energijos:

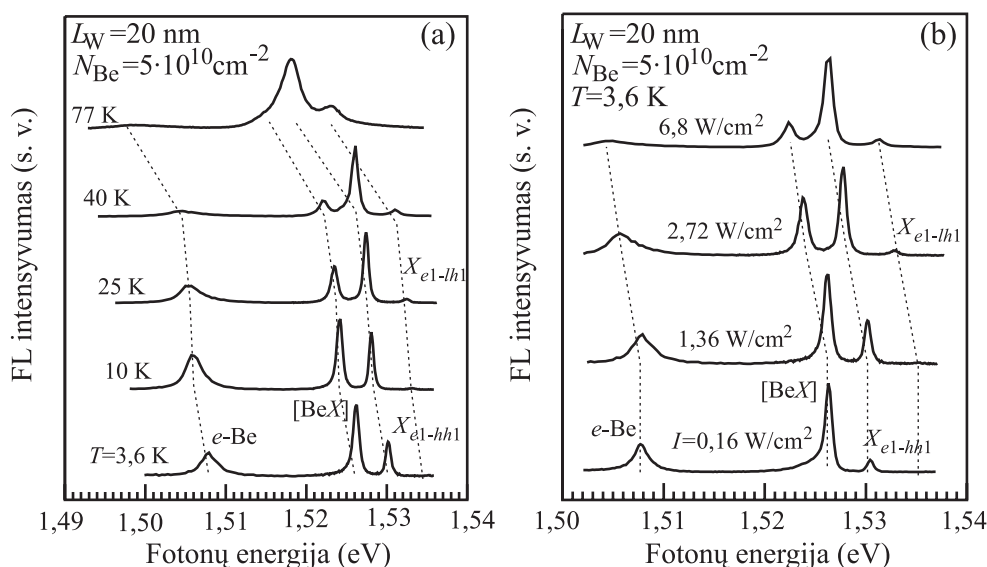
$$E_b[\text{DX}] = f_H E_D. \quad (3.5)$$

čia  $f_H$  yra proporcingumo faktorius, kuris silicio kristalo atveju lygus  $f_H = 0,1$ . R. C. Miller su bendraautoriais [105] pritaikė šią taisyklę akceptorinėmis priemaišomis legiruotiems 5–20 nm pločio GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As ( $x = 0,2–0,5$ )



kvantiniams šuliniams ir nustatė faktoriaus vertę  $f_H = 0,133$ . Su Be priemaiša surištojo eksitono ryšio energija apskaičiuota pasinaudojant Haynes taisykle, taip pat, pateikta 4 lentelėje. Skaičiavimams naudotos teorinės Be priemaišų jonizacijos energijos GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantiniuose šuliniuose (žr. 6 lent.) ir GaAs [111]. Surištojo su akceptoriumi eksitono ryšio energija kvantiniuose šuliniuose didesnė už tūriniame GaAs su akceptoriumi surištojo eksitono ryšio energiją, kuri lygi 2,9 meV [109]. Ekstrapoliuojant Haynes taisyklę tūriniam GaAs, gaunama apie 30 % didesnė surištojo eksitono ryšio energija. Tai rodo, kad darbe [105] yra parinkta per didelė  $f_H$  vertė. Taip pat, tai patvirtina ir mūsų eksperimentai.

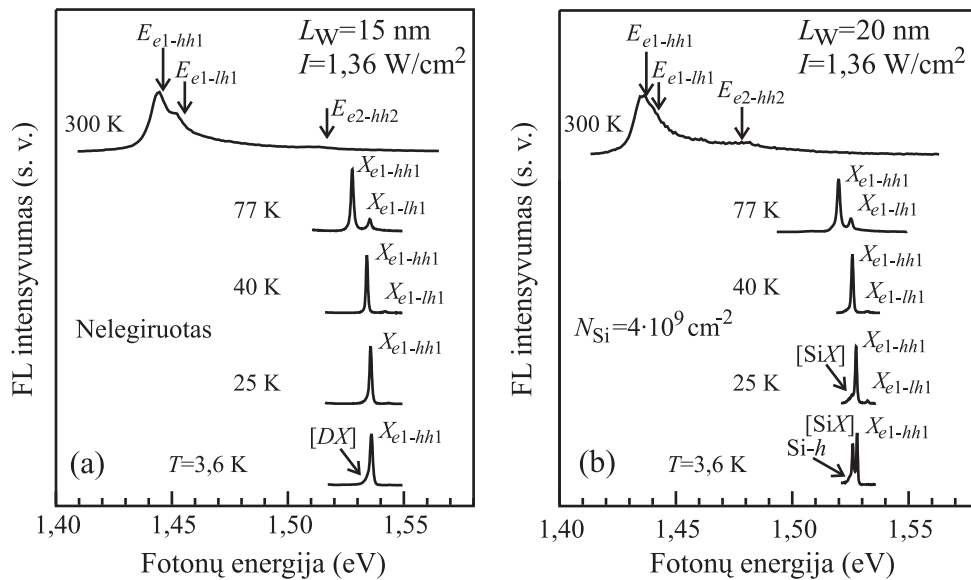
Mažinant gardelės temperatūrą nuo 77 K iki 3,6 K didėja [BeX] smailių intensyvumas ir esant 3,6 K temperatūrai sudaro didesnę dalį viso FL spektro intensyvumo, esant silpnam sužaditimui (žr. 16 (a, b) pav.). Didinant žadinančios šviesos intensyvumą, eksitoninių smailių indėlis didėja (žr. 16 (b) pav.) ir maksimumai šiek tiek slenka į mažesniųjų energijų pusę dėl juostų pernормavimo. Kartotinių kvantinių šulinių  $L_W = 5 \text{ nm}$  ir  $N_{\text{Be}} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  FL



**16 pav.** Be  $\delta$ -legiruoatų GaAs/AlAs kartotinių kvantinių šulinių, kurių plotis  $L_W = 20 \text{ nm}$  ir priemaišų tankis  $N_{\text{Be}} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ , savitosios FL spinduliuotės spektrų priklausomybė **(a)** nuo temperatūros ir **(b)** nuo intensyvumo, esant 3,6 K temperatūrai. Spektrai yra normuoti ir perstumti vertikalioje skalėje. Punktyrinės linijos dėl vaizdumo žymi smailių poslinkį.

spektruose (15 (c) pav.), net ir esant 3,6 K temperatūrai, vyrauja laisvųjų eksitonų smailė. Ji šiek tiek išplitusi į mažesniųjų energijų pusę. Šis išplitimas susijęs su akceptoriais ir liekamaisiais donoriais surištųjų eksitonų spinduliuotėmis, kurių šiuo atveju nepavyko išskirti iš bendro spektro.

Panašūs savitosios spinduliuotės spektrai, kurie pavaizduoti 17 paveiksle, stebėti nelegiruotuose ( $L_w = 15$  nm) ir  $n$ -tipo Si  $\delta$ -legiruotuose ( $N_{Si} \leq 1 \cdot 10^{10}$  cm $^{-2}$ ) kartotiniuose  $L_w = 20$  nm pločio GaAs/AlAs kvantiniuose šuliniuose. Kambario temperatūroje stebima aukštesnių lygmenų  $X_{e2-hh2}$  eksitoninė spinduliuotė. Sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitoninės smailės  $X_{e1-hh1}$  ir  $X_{e1-lh1}$  yra susiliejusios. Tuo tarpu skystojo azoto temperatūroje šios smailės yra atsiskyrusios. Esant mažesnei nei 40 K temperatūrai, Si legiruotų bandinių spektre (17 (b) pav.) yra stebimos su Si donoru surištojo eksitono [SiX] ir Si donoras-valentinė juosta Si- $h$  rekombinacijų spinduliuotės. Su liekamuoju donoru surištojo eksitono [DX] spinduliuotė stebima ir nelegiruotų kvantinių šulinių spektre esant žemai temperatūrai.



**17 pav. (a)** Nelegiruotų  $L_w = 15$  nm ir **(b)**  $N_{Si} = 4 \cdot 10^9$  cm $^{-2}$  Si  $\delta$ -legiruotų  $L_w = 20$  nm pločio GaAs/AlAs kartotinių kvantinių šulinių savitosios FL spinduliuotės spektrai esant įvairioms temperatūroms. Spektrai yra normuoti ir perstumti vertikaliajoje skalėje. [SiX] ir [DX] žymi surištojo eksitono su Si donoru ir liekamuoju donoru spinduliuotė, Si- $h$  – Si donoras-valentinė juosta rekombinacijos spinduliuotė. Kiti simboliai paaiškinti 15 pav.

Iš FL spektrų eksperimentiškai rastos su donoru surišųjų eksitonų ryšio energijos  $L_w = 15$  ir  $20$  nm pločio kvantiniuose šuliniuose pateiktos 4 lentelėje. Jos yra artimesnės eksperimentinėms vertėms rastoms GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As ( $x < 0,4$ ) kvantiniuose šuliniuose [107, 108]. Tačiau dar didesnės už D. A. Kleinman [112] apskaičiuotas teorines ir X. Liu ir kt. [95] rastas eksperimentines vertes. Prieštaravimus galima paaiškinti neteisinga kai kurių smailių interpretacija. Į tai buvo atkreipta darbe [113]. Mūsų atveju su donoru surišųjų eksitonų ryšio energijos yra didesnės dėl gilesnių kvantinių šulinių, nes GaAs/AlAs atveju barjerai yra aukštesni nei GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As ( $x < 0,4$ ).

Mes nustatėme faktoriaus  $f_H = 0,185$  vertę donorais legiruotiems GaAs/AlAs kvantiniams šuliniams. Su Si priemaiša surišotojo eksitono ryšio energija apskaičiuota pasinaudojant Haynes taisykle pateikta 4 lentelėje. Skaičiavimams naudotos teorinės Si priemaišų jonizacijos energijos GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantiniuose šuliniuose (žr. 6 lent.) ir GaAs [111].

### **3.2 Savitoji spinduliuotė**

I-ojo tipo GaAs/AlAs kvantiniuose šuliniuose elektronai ir skylės nėra atskirti erdvėje. Todėl elektronų ir skylių Coulomb sąveika yra labai stipri. Dėl šios priežasties kvantinių šulinių sugertis bei spinduliuotė yra eksitoninė. Bandymai įrodo, kad, lyginant su tūrinio GaAs atveju, kvantinių šulinių FL spektruose eksitoninė spinduliuotė dominuoja net kambario temperatūroje. Tarpjuostinė ir eksitoninė spinduliuotės kartu sudaro savitąją spinduliuotę.

#### **3.2.1 Savitosios spinduliuotės fotoluminescencijos spektro linijų pavidalas**

Norint ištirti ir įvertinti priemaišų įtaką savitosios spinduliuotės spektro linijoms, reikia ištirti šių smailių pavidalą. Pirmasis žingsnis yra apskaičiuoti smailių energinę padėtį. Reikia spręsti dvimačiam dariniui kvantinės mechanikos uždavinį su Coulomb potencialu. Tačiau Coulomb uždavinys, kuris taikomas priemaišų ir eksitonų energijai apskaičiuoti analiziškai neišsprendžiamas. Paprastai atliekami skaitmeniniai skaičiavimai taikant

variacionius ar perturbacijų metodus. Paprastesniu atveju nagrinėjami begalinio aukščio barjerų kvantiniai šuliniai, kurie laikomi griežtai dvimačiais (2D). Tačiau realiųjų baigtinio gylio kvantinių šulinių eksitonai nėra griežtai dvimačiai. Jie yra tarpiniai tarp dvimačių 2D ir trimačių 3D, kadangi krūvininkų banginės funkcijos išsiskverbimas į barjerus praplečia dimensiją. Tokiu atveju būtų patogu naudotis trupmeninės dimensijos erdve, kurią pirmą kartą vandenilio uždaviniui spręsti panaudojo Frank H. Stillinger 1977 metais [114]. 1990 metais Xing-Fei He pritaikė trupmeninės dimensijos erdvės modelį anizotropinių medžiagų optinėms savybėms tirti [67, 68]. Šiuo modeliu remiantis, trimatė anizotropinė sistema gali būti nagrinėjama kaip izotropinė tam tikroje trupmeninės dimensijos erdvėje. Tuomet vienintelis parametras dimensija apibūdina visą informaciją apie sistemos anizotropiškumą ar mažų matmenų sistemos apribojimus. Taikydamas šį modelį X. F. He apskaičiavo eksitonų anizotropinėse medžiagose bangines funkcijas, ryšio energiją ir su jais susijusį optinį spektrą sprendžiant vandenilio tipo Schrödinger lygtis  $\alpha D$  erdvėje [69]. Šiuo atveju eksitonų bei priemaišų energijos spektras ir Bohr spindulys užrašomi

$$E_n = \frac{Ry}{\left(n + \frac{\alpha - 3}{2}\right)^2}, \quad (3.6)$$

$$a_n = a_0 \left(n + \frac{\alpha - 3}{2}\right)^2; \quad (3.7)$$

čia  $n$  – pagrindinis kvantinis skaičius,  $Ry$  ir  $a_0$  – eksitonų arba priemaišų Rydberg energija ir Bohr spindulys 3D atveju. Parametras  $\alpha$  yra dimensija, kuri dvimačiu 2D atveju lygi  $\alpha = 2$ , o trimačiu 3D atveju lygi  $\alpha = 3$ . Iš (3.6) lygties seka, kad eksitono ar priemaišos ryšio energija dvimačiu 2D atveju yra keturis kartus didesnė nei trimačiu 3D, t. y.  $E_1(2D) = 4Ry$ , o  $E_1(3D) = Ry$ .

Kitas žingsnis yra spektrinių smailių pavidalo analizė. Eksitonų fotoluminescencijos spektrų analizei panaudojome bedimensinį sugerties koeficientą, kuris teoriškai apskaičiuotas  $\alpha$ D erdvėje [70, 115], ir lygus

$$O(\hbar\omega) = O_0 \left[ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4Ry_X \Gamma(n + \alpha - 2)}{(n-1)! \left(n + \frac{\alpha - 3}{2}\right)^{\alpha+1}} \delta(\hbar\omega - E_n) + \left| \Gamma\left(\frac{\alpha - 1}{2} + i\gamma\right) \right|^2 e^{\pi\gamma} \frac{\gamma^{2-\alpha}}{\pi} \Theta(\hbar\omega) \right]; \quad (3.8)$$

čia koeficientas  $\gamma$  lygus  $\gamma = \sqrt{Ry_X / \hbar\omega}$ ,  $Ry_X$  – eksitono Rydberg energija 3D atveju,  $\hbar\omega$  – fotono energija.  $\Gamma(x)$  yra Euler gama funkcija,  $\delta(x)$  – Dirac delta funkcija, o  $\Theta(x)$  – vienetinio laiptelio Heaviside funkcija. Daugiklis  $O_0$  lygus

$$O_0 = \frac{2^{2\alpha-3} e^2 |d_{cv}|^2 L^{\alpha-2} \left[ \Gamma\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right]^2 \Gamma\left(\frac{\alpha-1}{2}\right)}{\pi^{(\alpha-3)/2} n_B c m_0^2 \omega a_{0X}^\alpha Ry_X [\Gamma(\alpha-1)]^3}; \quad (3.9)$$

čia  $\omega$  – krintančios šviesos kampinis dažnis,  $n_B$  – medžiagos lūžio rodiklis.  $L$  yra efektinis ilgis, kuris begalinio gylio kvantiniams šuliniams, lygus jų pločiui. Realiųjų kvantinių šulinių atveju, efektinis ilgis yra šiek tiek mažesnis už kvantinio šulinio plotį.  $|d_{cv}|^2$  yra elektrono dipolio momento matricinis elementas. Pirmasis (3.8) lygties sumos narys aprašo diskretinį eksitonų sugerties spektrą, o antrasis – tolydinį. Realiųjų sistemų diskretinio sugerties spektro smailės yra išplitusios. Tuomet smailės pavidalui apskaičiuoti reikia taikyti Gauss arba Lorentz sąsūką. Savitajai sugerčiai artimesnis Lorentz modelis. Tuomet smailės pavidalas išreiškiamas formule

$$K_X = \int_0^\infty O(\hbar\omega - E) \frac{2w_L}{\pi(4E^2 + w_L^2)} dE; \quad (3.10)$$

čia  $w_L$  yra smailės plotis pusės intensyvumo aukštyje.

Tarpjuostinių optinių šuolių sugerties koeficientui apskaičiuoti panaudojome kompleksinę dielektrinę funkciją, kuri pateikta [68] darbe. Radome, kad tarpjuostinių optinių šuolių sugerties koeficientas  $\alpha D$  erdvėje lygus

$$K_{J-J} = \frac{2^{3-\alpha} \pi^{2-\alpha/2} e^2 |d_{cv}|^2 L^{\alpha-2} \left( \frac{2\mu_{cv}}{\hbar^2} \right)^{\alpha/2}}{\Gamma\left(\frac{\alpha}{2}\right) n_B c m_0^2 \omega} \sum_{\nu} (\hbar\omega - E_{QW}^{\nu\nu})^{\alpha-1} \Theta(\hbar\omega - E_{QW}^{\nu\nu}), \quad (3.11)$$

čia  $\mu_{cv} = m_c^* m_v^* / (m_c^* + m_v^*)$  – redukuota elektronų ir skylių efektinė masė.  $E_{QW}^{\nu\nu}$  yra energijos skirtumas tarp  $\nu$ -ojo laidumo juostos lygmens ir  $\nu$ -ojo valentinės juostos lygmens. Lygtys (3.8) ir (3.11) tenkina literatūroje gerai žinomus ribinius dvimačio ir trimačio atvejų sprendinius [116, 117, 118].

Fotoluminescencijos intensyvumą  $I_{FL}(E)$  su sugerties koeficientu  $K(E)$  sieja energijos balanso sąryšis

$$I_{FL}(E) \propto K(E) f(E), \quad (3.12)$$

čia  $f(E)$  yra tam tikra šiluminė pasiskirstymo funkcija. Neišsigimusių nešėjų atveju, ji tiesiog yra Boltzmann pasiskirstymo funkcija.

Taikant trupmeninės erdvės modelį svarbu žinoti kvantiniame šulinyje apribotų eksitonų dimensiją  $\alpha$ . Henry Mathieu ir kt. [73] pasiūlė apskaičiuoti dimensiją pagal eksponentinį dėsnį

$$\alpha = 3 - e^{-\frac{L_W}{2a_0}}, \quad (3.13)$$

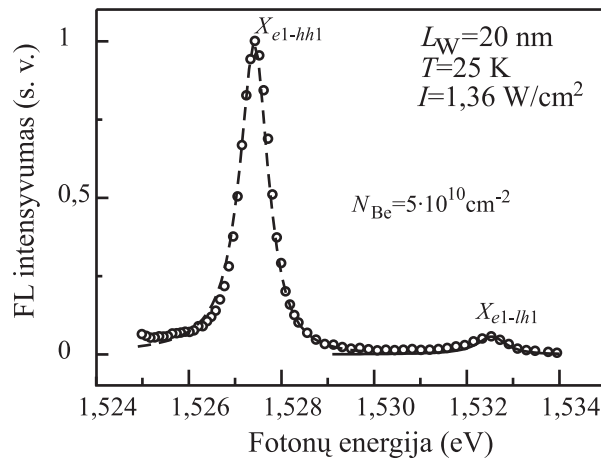
čia  $a_0$  – eksitono Bohr spindulys 3D atveju,  $L_W$  – kvantinio šulinio plotis. Šis būdas tinka tik begalinio gylio kvantiniams šuliniams. Realiems kvantiniams šuliniams, su baigtinio aukščio barjeriais, reikia atsižvelgti į krūvininkų banginių funkcijų išsiskverbimą į barjerus ir naudoti efektines Bohr spindulio vertes kvantiniame šulinyje. Dimensijos radimas detaliau įvertinus elektronų ir skylių santykinį judėjimą aptartas [72] darbe. Kitas galimas būdas yra tiesiogiai apskaičiuoti apytiksliai  $\alpha$  reikšmę, sprendžiant Schrödinger lygtį  $\alpha D$

erdvėje, kaip parodyta [71, 119] darbuose. Tai yra sudėtingas būdas. Eksperimentatoriams reikia paprasto ir patogaus būdo rasti dimensiją  $\alpha$ . Tam galima panaudoti eksperimentines ar teorines eksitonų ryšio energijos priklausomybes nuo kvantinio šulinio pločio. Tuomet iš (3.6) lygties randame dimensiją  $\alpha$ , esant įvairiems kvantinių šulinių pločiams. Rezultatai, gauti pasinaudojus Andreani apskaičiuotomis teorinėmis eksitonų ryšio energijomis [32] ir eksperimentine eksitono Rydberg energija  $Ry_X = 4,2$  meV [120], pateikti 5 lentelėje.

**5 lentelė.** Žemiausio lygmens sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitonų ryšio energijos [32] ir jas atitinkanti dimensija

$L_w, \text{nm}$	$E_b(X_{hh})$	$\alpha(hh)$	$E_b(X_{lh})$	$\alpha(lh)$
5	15,8	2,03	21,5	1,88
10	11,6	2,20	15	2,06
15	9,6	2,32	11,9	2,19
20	8,3	2,42	9,9	2,30

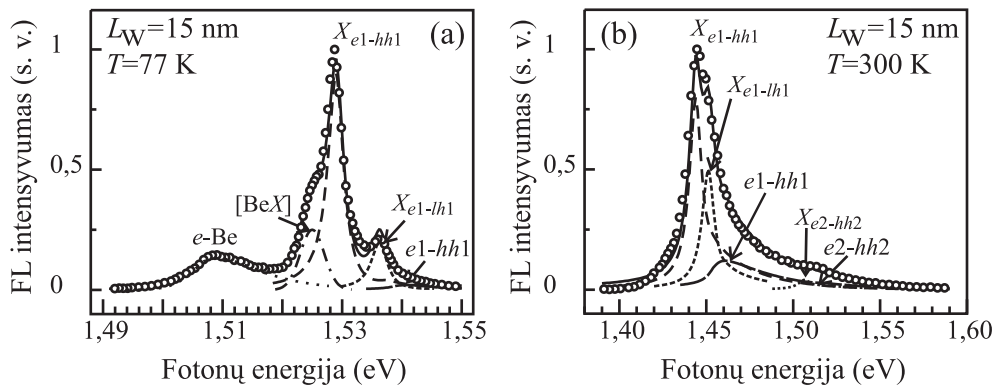
Atkreipsime dėmesį, kad siaurų GaAs/AlAs kvantinių šulinių atveju,  $\alpha$  gaunamas mažesnis nei du, nes juose eksitonų ryšio energija išauga daugiau nei keturis kartus dėl dielektrinės skvarbos ir efektinės masės pokyčio.



**18 pav.** Be  $\delta$ -legiruotų kartotinių GaAs/AlAs kvantinių šulinių, kurių plotis  $L_w = 20$  nm ir priemaišų tankis  $N_{Be} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ , eksitoninės spinduliuotės spektras 25 K temperatūroje. Taškai žymi eksperimentinius rezultatus, o linijos – teorinius skaičiavimus.

Pasinaudojus (3.8)–(3.12) lygtimis apskaičiuotas 20 nm pločio kvantinio šulinio laisvųjų eksitonų spektras 25 K temperatūroje pavaizduotas 18 paveiksle. Taškais atidėti eksperimentiniai rezultatai, o linijomis – sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitonų teorinės rekombinacijos spektrų kreivės. Skaičiavimams naudota sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitonų 20 nm pločio kvantiniuose šuliniuose dimensija  $\alpha$  pateikta 5 lentelėje. Esant 25 K temperatūrai, Lorentz kreivės plotis 0,5 lygyje sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitonams yra  $w_L = 0,8$  meV.

Esant labai žemoms temperatūroms, spinduliuotę lemia žemiausios eksitoninės būsenos susijusios su mažiausios energijos elektronų bei sunkiųjų ir lengvųjų skylių lygmenimis. Skystojo azoto ir kambario temperatūrose jau stebimi tarpjuostiniai šuoliai, pažymėti  $e1-hh1$  ir  $e2-hh2$  simboliais, ir šuoliai iš eksitoninių būsenų, susijusių su aukštesniais energiniais lygmenimis (žr. 19 pav.).



**19 pav.** Be  $\delta$ -legiruotų GaAs/AlAs kartotinių kvantinių šulinių, kurių plotis  $L_W = 15$  nm ir priemaišų tankis  $N_{Be} = 2,5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , FL spektras, esant (a) skystojo azoto ir (b) kambario temperatūroms. Taškai žymi eksperimentinius rezultatus, o linijos – teorinius skaičiavimus.  $e1-hh1$  ir  $e2-hh2$  žymi tarpjuostinius šuolius. Kiti žymėjimai paaiškinti 15 pav.

Skystojo azoto temperatūros  $L_W = 15$  nm pločio kvantinių šulinių savitosios spinduliuotės spektre (19 (a) pav.) įskaitytos sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitoninės spinduliuotės ir  $e1-hh1$  tarpjuostiniai optiniai šuoliai iš pirmojo elektronų lygmens į pirmąją sunkiųjų skylių lygmenį. Visoms šių šuolių kreivių sąsūkomis naudotas Lorentz kreivės plotis  $w_L = 3,5$  meV, o



dimensija  $\alpha$  pateikta 5 lentelėje. Surištojo eksitono su Be priemaiša [BeX] spinduliuotės kreivė aproksimuota Gauss funkcija, kurios visas plotis pusės aukštyje  $w_G = 4,7$  meV. Priemaišinė spinduliuotė e-Be aprašyta (3.28) lygtimi, priėmus  $\alpha = 2,87$  ir  $w_G = 4,7$  meV. Detaliau surištas eksitonas bus aptartas 3.2.2 skyrelyje. Priemaišinei spinduliuotei paaiškinti bus skirtas visas 3.3 poskyris.

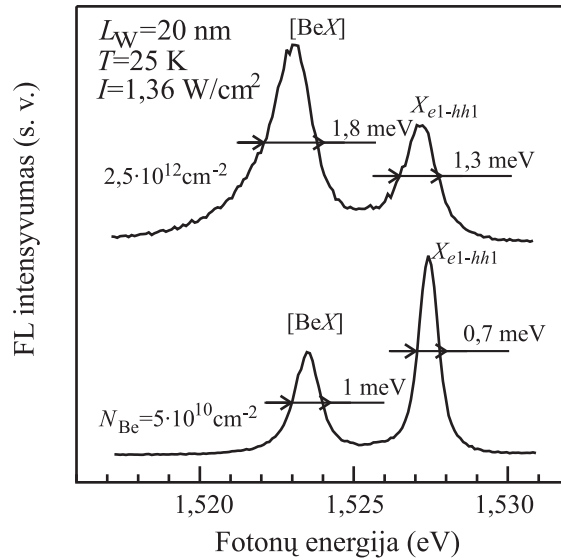
Kambario temperatūros spektre (19 (b) pav.) smailė, ties fotono energija 1,51 eV, yra susieta su elektronų šuoliais iš  $e2$  į  $hh2$  lygmenį. Šiems šuoliams įskaityti ir eksitoniniai reiškiniai. Pagal atrankos taisyklės begalinėje stačiakampėje potencinėje duobėje galimi šuoliai tarp valentinės ir laidumo juostos būsenų su vienodais kvantiniais skaičiais. Šie šuoliai intensyviausi sugerties, fotoluminescencijos ir žadinimo fotoluminescencijos spektruose. Skaičiavimams naudojome aukštesniųjų energinių lygmenų eksitono ryšio energiją  $E_b(X_{e2-hh2}) = 7,5$  meV [66], kuri atitinka dimensiją  $\alpha = 2,5$ . Visoms  $L_w = 15$  nm pločio kvantinių šulinių spinduliuotės kreivėms apskaičiuoti kambario temperatūroje naudota Lorentz sąsūka su kreivės pločiu 0,5 lygyje  $w_L = 9$  meV.

### 3.2.2 Priemaišų įtaka savitosios spinduliuotės spektrams

Įterpus į kvantinius šulinius priemaišų kyla klausimas, kokią įtaką turės priemaišos savitajai spinduliuotei? Kaip matyti iš FL spektrų, pateiktų 15 (b), 16 (a, b) ir 17 (b) paveiksluose, Be arba Si priemaišomis legiruotų kvantinių šulinių spinduliuotėje stebimos papildomos su priemaišomis surištuju eksitonu [BeX] arba [SiX] smailės. Taip pat įterptos priemaišos, kaip ir defektai, turėtų didinti spektrinių linijų plotį. Didinant priemaišų tankį, įtaka turėtų didėti. Tai rodo ir eksperimentiniai rezultatai. Dėl padidėjusio priemaišų tankio padidėja priemaišos energijos lygmenų išplitimas. Tai patvirtina ir  $L_w = 20$  nm pločio kvantinių šulinių eksperimentiniai rezultatai pateikti 20 paveiksle.

Su Be priemaiša surištojo eksitono [BeX] smailės pusės intensyvumo aukštyje plotis padidėja nuo 1 meV, kai priemaišų tankis  $N_{Be} = 5 \cdot 10^{10}$  cm<sup>-2</sup>, iki

1,8 meV, kai  $N_{\text{Be}} = 2,5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . Kaip matyti iš eksperimentinių duomenų, pateiktų 20 paveiksle, taip pat padidėja ir laisvojo eksitono linijos plotis 0,5 lygyje nuo 0,7 meV iki 1,3 meV.



**20 pav.** Be  $\delta$ -legiruotų  $N_{\text{Be}} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  ir  $N_{\text{Be}} = 2,5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  kartotinių GaAs/AlAs  $L_W = 20 \text{ nm}$  pločio kvantinių šulinių savitosios spinduliuotės spektrai, kai  $T = 25 \text{ K}$ . [BeX] žymi surištojo su Be akceptorine priemaiša, o  $X_{e1-hh1}$  laisvojo eksitonų spinduliuotes.

Dažniausiai, linijos plotis  $\Gamma$  nustatomas iš FL spektrų naudojantis Gauss ar Lorentz aproksimacija. Surištųjų eksitonų smailes, kaip ir atsitiktinių priemaišų pasiskirstymą, galima aprašyti Gauss funkcija. Laisvojo eksitono linijos pavidalas yra artimesnis Lorentz funkcijai aukštesnėje temperatūroje. Manoma, kad Gauss funkcija turėtų būti naudojama labai žemoje temperatūroje, kai eksitonų sklaida fononais yra nereikšminga, o eksitoninę smailę lemia nehomogeniškas išplitimas. Eksperimentinių rezultatų analizė parodė, kad ir esant 3,6 K temperatūrai eksitoninė smailė geriau yra aproksimuojama Lorentz funkcija. Tai reiškia, kad esant ir žemai temperatūrai kvantiniuose šuliniuose nėra didelis nehomogeninės dalies įnašas į linijos išplitimą. Lieka svarbi sklaida akustiniais fononais ir savitoji sklaida dėl baigtinės eksitono gyvavimo trukmės, kuri susijusi su kvantine mechanika.

Tirdami  $L_W = 20 \text{ nm}$  pločio ir  $N_{\text{Be}} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  priemaišų tankiu legiruotų GaAs/AlAs kvantinių šulinių eksitoninių smailių išplitimą nuo

temperatūros pagal (1.24) lygtį nustatėme eksitonų sąveikos su akustiniais ir optiniais fononais koeficientus  $a \approx 10 \mu\text{eV/K}$  ir  $b \approx 15 \text{ meV}$ , bei nehomogeninį linijos plotį  $\Gamma_0 \approx 0,7 \text{ meV}$ , kai krintančios šviesos intensyvumas  $1,36 \text{ W/cm}^2$ . Keičiant žadinančios šviesos intensyvumą nuo  $0,16$  iki  $13,6 \text{ W/cm}^2$  visas linijos plotis  $\Gamma$  pusės maksimumo aukštyje padidėjo tiesiškai nuo  $0,53$  iki  $2,5 \text{ meV}$ , kai gardelės temperatūra buvo  $3,6 \text{ K}$ . Stipriau legiruotiems ( $N_{\text{Be}} = 2,5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ )  $L_w = 20 \text{ nm}$  pločio kvantiniams šuliniams atitinkamai rastos vertės  $a \approx 11 \mu\text{eV/K}$ ,  $b \approx 41 \text{ meV}$  ir  $\Gamma_0 \approx 1 \text{ meV}$ .

Siliciu  $N_{\text{Si}} = 1 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  legiruotų  $L_w = 20 \text{ nm}$  pločio GaAs/AlAs kvantinių šulinių atveju, nustatėme nehomogeninį linijos plotį  $\Gamma_0 \approx 0,39 \text{ meV}$  ir eksitonų sąveikos su akustiniais bei optiniais fononais koeficientus  $a \approx 10 \mu\text{eV/K}$  ir  $b \approx 4 \text{ meV}$ .

Gauti duomenys gerai atitinka kitų autorių eksperimentinius ir teorinius rezultatus. Pavyzdžiui, nelegiruotų  $20 \text{ nm}$  pločio GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kvantinių šulinių eksitoninių linijų plotis  $\Gamma_0 \approx 0,4 \text{ meV}$  [77] arba  $0,057 \text{ meV}$  [80], o fononų sklaidos koeficientai kinta intervaluose  $a \approx 2\text{--}10 \mu\text{eV/K}$  [80, 78, 79] ir  $b \approx 10\text{--}71 \text{ meV}$  [80, 78]. Taip pat mūsų nustatyti silpnai  $\delta$ -legiruotų GaAs/AlAs kvantinių šulinių eksitonų sąveikos su fononais koeficientai yra šiek tiek mažesni negu tūriniame GaAs kristale  $a \approx 13 \mu\text{eV/K}$  ir  $b \approx 30 \text{ meV}$  [82]. Visa tai rodo, kad kvantiniuose šuliniuose gaunamos siauresnės eksitoninės linijos negu tūriniame GaAs.

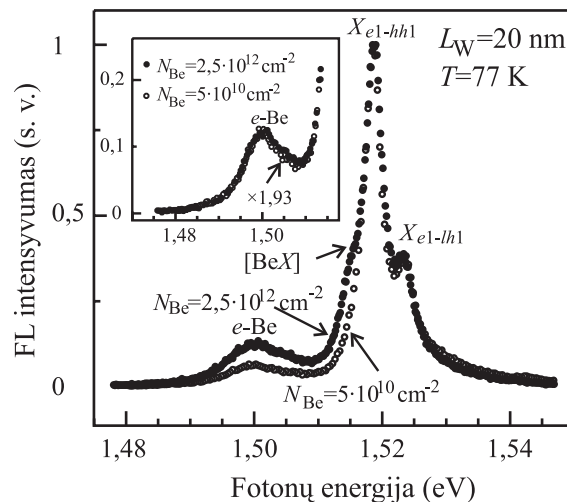
Iš rezultatų matyti, kad eksitoninės linijos plotį įtakoja ne tik bandinio temperatūra ar krintančios šviesos intensyvumas bet ir priemaišų tankis šuliniuose. Priemaišos tiesiogiai didina nehomogeninę eksitoninės linijos pločio dalį. Taip pat gali įtakoti netiesiogiai per eksitono sąveiką su priemaiša ir optiniu fononu. Šią įdomią savybę pastebėjome  $p$ -tipo legiruotiems bandiniams. Tai yra susiję su tuo, kad akceptoriaus jonizacijos energija yra artima optinio fonono energijai. Dėl šios priežasties pasireiškia stipri sąveika su optiniu fononu. Tai bus plačiau aptarta 4 skyriuje nagrinėjant fononines

replikas. Čia pastebėsime, tokiu būdu pasiaiškina optinių fononų sąveikos su eksitonais koeficiento  $b$  priklausomybė nuo priemaišos tipo, bei priklausomybė nuo akceptorinių priemaišų tankio.

### 3.3 Priemaišinė spinduliuotė

#### 3.3.1 Eksperimentiniai rezultatai

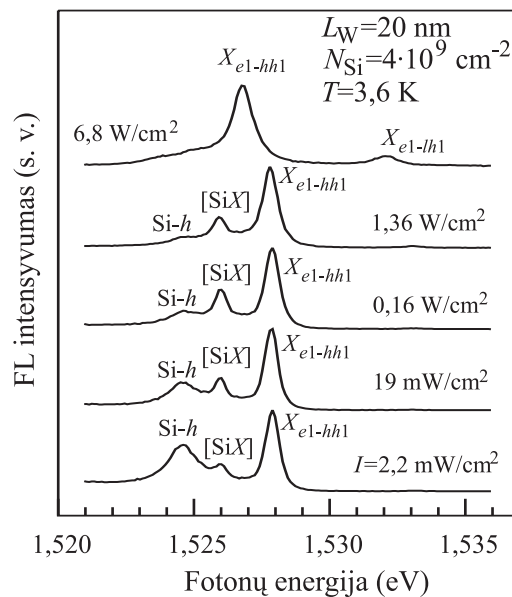
Kaip matėme iš 15 paveikslu, žemų temperatūrų FL spektruose atsiranda smailė  $e$ -Be, susijusi su laisvųjų elektronų rekombinacija su akceptorinėmis priemaišomis. Skirtingo pločio kvantiniams šuliniams šių smailių padėtis absoliutinėje energijos skalėje yra nevienoda. Tai susiję ne tik su valentinės juostos lygmenų pasikeitimu, bet ir su priemaišų jonizacijos energijos didėjimu, jas apribojant barjeriais skirtingo pločio kvantiniuose šuliniuose [83, 89, 90, 91, 94]. Šiai priemaišinės spinduliuotės  $e$ -Be smailei būdinga keletas ypatumų. Jos santykinė padėtis eksitono ar surištojo eksitono smailių atžvilgiu nekinta nuo žadinimo intensyvumo (žr. 16 (b) pav.).  $e$ -Be smailės padėtis nepriklauso nuo priemaišų tankio iki  $N_{\text{Be}} = 2,5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  ir linija nėra susiliejęsi su eksitonine spektro dalimi (žr. 21 pav.). Visa tai rodo kad nesiformuoja



**21 pav.** Kartotinių  $L_W = 20 \text{ nm}$  GaAs/AlAs kvantinių šulinių  $\delta$ -legiuotų Be priemaišomis  $N_{\text{Be}} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  (šviesūs skrituliai) ir  $2,5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (tamsūs skrituliai) FL spektrai esant skystojo azoto temperatūrai. Intarpe išskirta priemaišinės spinduliuotės  $e$ -Be dalis.

priemaišinė juosta. Todėl esant nedideliems legiravimo tankiams, galime priemaišas laikyti nesąveikaujančiomis. Esant tokiems tankiams linijos ne tik padėtis, bet ir pavidalas nepriklauso nuo priemaišų tankio ir žadinančios šviesos intensyvumo. Trivialu, jog didinat priemaišų kiekį, didėja tik linijos intensyvumas. Galiausiai parodysime, kad linijos forma yra asimetrinė.

Silpnai Si  $\delta$ -legiruotų  $N_{Si} = 4 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$  kartotinių GaAs/AlAs  $L_w = 20 \text{ nm}$  pločio kvantinių šulinių žemų temperatūrų FL spektruose buvo stebėta donorinė priemaišinė Si- $h$  spinduliuotė (17 (b) ir 22 pav.). Ją galima stebėti esant žemoms gardelės temperatūroms ir mažam žadinančios šviesos intensyvumui. Tai galima paaiškinti tuo, kad didinant temperatūrą dėl mažesnės jonizacijos energijos visi donoriai daug greičiau jonizuojami už akseptorius. Taip pat dėl mažo legiravimo tankio, didinant žadinančios šviesos intensyvumą, D- $h$  smailės intensyvumas greitai įsisotina. Tuo tarpu labai stipriai išauga eksitoninių linijų intensyvumai.



**22 pav.** Si  $\delta$ -legiruotų kartotinių GaAs/AlAs kvantinių šulinių, kurių plotis  $L_w = 20 \text{ nm}$  ir priemaišų tankis  $N_{Si} = 4 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ , FL spektrų priklausomybė nuo žadinančios šviesos intensyvumo 3,6 K temperatūroje. Spektrai yra normuoti ir perstumti vertikaliuoje skalėje. Simboliai atitinka 15 ir 17 pav.

Priemaišomis legiruotų kvantinių šulinių FL spektruose stebima ne tik eksitoninė spinduliuotė, bet ir laisvųjų elektronų rekombinacijos su

akceptoriais  $e$ -Be arba laisvųjų skylių rekombinacijos su donorais Si- $h$  spinduliuotės. Iš šių spinduliuočių smailių energinės padėties galime nustatyti akceptoriaus arba donoro jonizacijos energiją

$$E_A = E(X_{e1-hh1}) + E_b(X_{hh}) - E(e\text{-Be}), \quad (3.14)$$

$$E_D = E(X_{e1-hh1}) + E_b(X_{hh}) - E(\text{Si-}h). \quad (3.15)$$

Mūsų nustatytos eksperimentinės priemaišų jonizacijos energijų vertės 6 lentelėje palygintos su kitų autorių rastosiomis eksperimentinėmis ir teorinėmis vertėmis.

**6 lentelė.**  $E_A$  akceptoriaus ir  $E_D$  donoro jonizacijos energijos kvantiniuose šuliniuose

$L_w$ , nm	$E_A$ , meV			$E_D$ , meV		
	Mūsų eksp. GaAs/AlAs	Eksp. GaAs/AlAs	Teor. GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As	Mūsų eksp. GaAs/AlAs	Eksp. GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As	Teor. GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As
5	42	40 <sup>a</sup>	45 <sup>b</sup>	...	...	16 <sup>b</sup>
10	36	34 <sup>a</sup>	34 <sup>b</sup>	...	13 <sup>c</sup>	13,2 <sup>b</sup>
15	32	32 <sup>a</sup>	31 <sup>b</sup>	...	11,2 <sup>c</sup>	11,4 <sup>b</sup>
20	30	29 <sup>a</sup>	29 <sup>b</sup>	11,6	10 <sup>c</sup>	10,2 <sup>b</sup>
GaAs	...	28 <sup>d</sup>	26 <sup>d</sup>	...	5,84 <sup>d</sup>	5,79 <sup>d</sup>

<sup>a</sup> [94], <sup>b</sup> [91], <sup>c</sup> [95], <sup>d</sup> [111].

Priemaišomis legiruoti GaAs/AlAs kvantiniai šuliniai gali būti panaudoti kuriant terahercų srities emiterius ir jutiklius. Keičiant kvantinių šulinių plotį, donorinių priemaišinių lygmenų energiją galima keisti nuo 6 meV iki 16 meV. Tai atitinka dažnį nuo 1,4 THz iki 3,8 THz. Tuo tarpu, keičiant Be akceptorinėmis priemaišomis legiruotų GaAs/AlAs kvantinių šulinių plotį, priemaišinių lygmenų energiją galima keisti nuo 28 meV iki 45 meV arba dažnį 6,8–10,9 THz intervale.

### 3.3.2 Priemaišinės spinduliuotės spektro asimetrija

Teorinei nesąveikaujančiųjų priemaišų kvantiniuose šuliniuose spinduliuotės analizei taikysime trupmeninių dimensijų erdvės modelį. Jei priemaišos yra tolygiai pasiskirsčiusios kvantiniame šulinyje, tai uždavinys

tampa daug sudėtingesnis. Kadangi priemaišos energija priklauso nuo jų padėties kvantiniame šulinyje, tuomet reikia rasti dimensiją  $\alpha$  visoms priemaišų padėtimis kvantiniame šulinyje [119]. Mūsų atveju priemaišos yra siaurame  $\delta$  sluoksnyje kvantinio šulinio centre ir galime laikyti, kad jų energija ir šuolių tikimybė yra pastovūs dydžiai.

Pirmiausia panagrinėsime priemaišinę spinduliuotę, susijusią su akceptoriais. Kvantinio šulinio centre akceptorius keičia simetriją iš  $T_d$  į  $D_{2d}$  ir jo žemiausias  $\Gamma_8$  lygmuo skyla į dubletą ( $\Gamma_6$  ir  $\Gamma_7$ ), kuris siejamas su lengvosiomis ir sunkiosiomis skylėmis [89, 101]. Šios būsenos yra išsigimusios ir išskiriamos į atskirus lygmenis tik nagrinėjant aukštesnius lygmenis. Eksperimentiškai šį suskilimą galima stebėti naudojant žadinimo ar selektyviąją fotoluminescenciją [102]. Tuo tarpu įprastos fotoluminescencijos spektruose svarbiausias vaidmuo tenka sunkiųjų skylių būsenai. Tai leidžia manyti, kad modeliuojant priemaišinę spinduliuotę pakanka įskaityti tik vieną žemiausią akceptoriaus būseną. Taip pat taikydami TDE modelį, laikome kad kvantiniame šulinyje elektronų ir priemaišų Bloch funkcijos yra izotropinės, o šulinių plotis yra didesnis už tūrinių kristalų gardelės pastoviąją. Todėl kvantinis apribojimas keičia banginės funkcijos gaubiamąją, bet nekeičia funkcijos periodinės dalies [118]. Atsižvelgiant į šias prielaidas, elektronų ir akceptorinių priemaišų banginės funkcijos gali būti nagrinėjamos remiantis trupmeninių dimensijų erdvės modeliu. Šiuo atveju dimensija apibrėžia kvantavimo anizotropijos laipsnį. Šuolio iš pirmojo laidumo juostos lygmens į akceptorių sugerties koeficientas gali būti skaičiuojamas pagal D. M. Eagles [121] ar W. P. Dumke [122] pasiūlytus metodus 3D atvejui.

Sekdami P. Lefebvre idealogija [70], apskaičiavome bedimensinį sugerties koeficientą mažų dimensijų struktūroms. Fotono sugerties tikimybė dipoliniame artėjime lygi [123]:

$$W_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |d_{cv}|^2 |a(k)|^2 \rho(k) \delta(\hbar\omega - E_{QW} + E_A); \quad (3.16)$$

čia  $|d_{cv}|^2$  yra elektrono dipolio momento matricinis elementas,  $a(k)$  – akceptoriaus banginės funkcijos Fourier transformacija,  $\rho(k)$  – pradinių ir galinių būsenų sandauga,  $E_{QW}$  – energijos skirtumas tarp elektronų ir skylių lygmenų kvantiniame šulinyje, o  $E_A$  – akceptoriaus jonizacijos energija. Šuolio laisvas elektronas-akceptorius sugerties koeficientas užrašomas lygtimi

$$K = \frac{4\pi^2 e^2}{n_B c m_0^2 \omega S} |d_{cv}|^2 |a(k)|^2 \rho(E); \quad (3.17)$$

čia energija  $E = \hbar\omega - E_{QW} + E_A$ ,  $S$  – plotas ir  $\rho(E)$  išreiškiamas lygtimi

$$\rho(E) = g_I N_I S G_\alpha(\hbar\omega); \quad (3.18)$$

čia  $g_I$  ir  $N_I$  yra atitinkamai priemaišų išsigimimo laipsnis ir tankis [ $1/\text{cm}^2$ ].  $G_\alpha(E)$  yra laisvųjų būsenų tankis, kuris naudojant TDE modelį, užrašomas lygtimi [67]

$$G_\alpha(E) = \frac{2\Omega_\alpha}{\Gamma\left(\frac{\alpha}{2}\right)} \left(\frac{m_c^*}{2\pi\hbar^2}\right)^{\alpha/2} E^{\alpha/2-1} \Theta(E); \quad (3.19)$$

čia daugiklis 2 įskaito sukinių išsigimimą.  $\Omega_\alpha$  yra  $\alpha D$  Hausdorff erdvės tūris

$$\Omega_\alpha(r) = \frac{\pi^{\alpha/2}}{\Gamma\left(1 + \frac{\alpha}{2}\right)} r^\alpha. \quad (3.20)$$

Laikysime, kad akceptoriai yra vandenilio tipo priemaišos. Vandenilio tipo banginė funkcija  $F(\vec{r})$  trupmeninių dimensijų erdvėje lygi [69]:

$$F(r) = \left[ \frac{2^{\alpha+1} \pi^{\frac{1-\alpha}{2}}}{\Gamma\left(\frac{\alpha-1}{2}\right) (\alpha-1)^{\alpha+1} a_0^\alpha} \right]^{1/2} e^{-\frac{2}{(\alpha-1)a_0} r}; \quad (3.21)$$

čia  $a_0$  yra akceptoriaus Bohr spindulys 3D atveju.



Fourier transformacija TDE modelyje užrašoma sekančiai [114]

$$a(k) = (2\pi)^{\alpha/2} \int_0^{\infty} r^{\alpha-1} (kr)^{1-\frac{\alpha}{2}} J_{\alpha/2-1}(kr) F(r) dr ; \quad (3.22)$$

čia  $J_{\alpha/2-1}(kr)$  žymi Bessel funkciją. Tuomet TDE modelio atveju, pasinaudojus (3.21) ir (3.22) lygtimis, koeficiento kvadratas  $|a(k)|^2$  lygus

$$|a(k)|^2 = 2^\alpha \pi^{\frac{\alpha-1}{2}} (\alpha-1)^\alpha \Gamma\left(\frac{1+\alpha}{2}\right) \frac{a_0^\alpha}{\Omega_\alpha \left[1 + a_0^2 k^2 \left(\frac{\alpha-1}{2}\right)^2\right]^{1+\alpha}} . \quad (3.23)$$

Atlikę matematinis veiksmus gauname sugerties koeficientą, kuris lygus

$$K = N_I g_I \frac{4\pi^2 e^2}{c n_B m_0^2 \omega} |d_{cv}|^2 \frac{2^{\alpha+1} \Gamma\left(\frac{\alpha+1}{2}\right) \left(\frac{m_c^*}{m_p^*}\right) \frac{1}{Ry_I \left(\frac{2}{\alpha-1}\right)^2} \times}{\pi^{1/2} \Gamma\left(\frac{\alpha}{2}\right)} \times \quad (3.24)$$

$$\left[ \frac{m_c^*}{m_p^*} \frac{E}{Ry_I \left(\frac{2}{\alpha-1}\right)^2} \right]^{\frac{\alpha}{2}-1} \Theta(E) / \left[ 1 + \frac{m_c^*}{m_p^*} \frac{E}{Ry_I \left(\frac{2}{\alpha-1}\right)^2} \right]^{\alpha+1} ;$$

čia  $Ry_I$  yra akceptoriaus jonizacijos energija 3D atveju,  $m_p^*$  – efektinė masė skylės susijusios su akceptoriumi. Akceptoriaus jonizacijos energija  $\alpha D$  erdvėje pagal (3.6) lygtį, kai  $n = 1$ , yra lygi

$$E_A = Ry_I \left(\frac{2}{\alpha-1}\right)^2 . \quad (3.25)$$

Sugerties koeficientas apskaičiuojamas pagal (3.24) lygtį gali būti pritaikytas donoras-valentinė juosta šuoliams pakeičiant atitinkamai efektines mases ir akceptoriaus jonizacijos energiją į donoro jonizacijos energiją.

Trimačiu (3D) atveju, elektronas-akceptorius šuolių sugerties koeficientas lygus

$$K = N_I \frac{128\pi g_I e^2}{c n_B m_0^2 \omega} |d_{cv}|^2 \left( \frac{m_c^*}{m_p^*} \right) \frac{1}{E_A} \frac{x^{1/2}}{[1+x]^4}; \quad (3.26)$$

čia

$$x = \left( \frac{m_c^*}{m_p^*} \right) \frac{E}{Ry_I \left( \frac{2}{\alpha - 1} \right)^2} = \left( \frac{m_c^*}{m_p^*} \right) \frac{E}{E_A}. \quad (3.27)$$

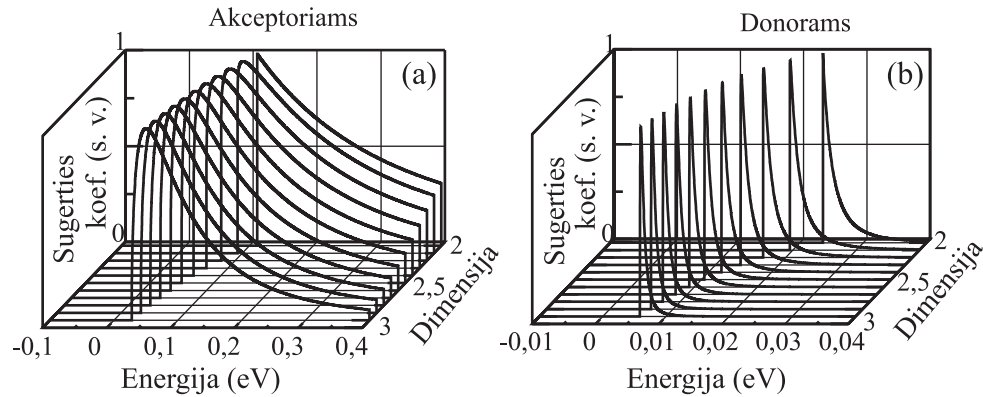
Imdami  $N_I$  [1/cm<sup>3</sup>] ir akceptoriams  $g_I=4$  bei donorams  $g_I=2$  gauname gerai literatūroje žinomus sugerties koeficiento rezultatus 3D atveju [121, 122]. Grynai dvimačiu 2D atveju (3.24) lygtis užrašoma tokiu pavidalu

$$K = N_I \frac{16\pi^2 g_I e^2}{c n_B m_0^2 \omega} |d_{cv}|^2 \left( \frac{m_c^*}{m_p^*} \right) \frac{1}{E_A} \frac{\Theta(x)}{[1+x]^3}. \quad (3.28)$$

Šiuo atveju  $E_A = 4Ry_I$ , priemaišų tankis  $N_I$  [1/cm<sup>2</sup>] ir sugerties koeficientas įgyja pavidalą, kuris gautas G. Bastard [83] darbe. Pagal (3.24) formulę apskaičiuoti laidumo juosta-akceptorius ir donoras-valentinė juosta šuolių sugerties koeficientai, esant įvairioms dimensijos vertėms, pavaizduoti atitinkamai 23 (a) ir (b) paveiksluose. Skaičiavimams naudotos Be akceptorius ir Si donoro tūriniame GaAs jonizacijos energijos  $Ry_I$  atitinkamai lygios 28 meV ir 5,84 meV [111], bei efektinės masės  $m_c^* = 0,0665m_0$  ir  $m_p^* = 0,377m_0$ .

Kaip matyti iš 23 paveikslo, mažėjant dimensijai tuo pačiu ir siaurėjant kvantiniam šuliniui, (3.24) formulės skaitiklio priklausomybė nuo energijos pakinta nuo ½ laipsnio rodiklio trimačiu atveju iki laiptelio formos dvimačiu atveju. Tuomet galima teigti, kad 2D atveju sugerties koeficiento skaitiklis nuo energijos nebeprislauso. Tuo tarpu paties sugerties koeficiento mažėjimas prie didesniųjų energijų yra susijęs su vardiklio nariu, kuris savo ruožtu priklauso nuo energijos. Pastarojo laipsnio rodiklis taip pat kinta, keičiantis dimensijai (kvantinio šulinio pločiui). Donoras-valentinė juosta šuolių sugerties koeficiento staigus mažėjimas susijęs su daug mažesne donorių jonizacijos energija palyginus su akceptorium ir didesniu efektyvių masių santykiu:

$m_p^*/m_c^* \gg m_c^*/m_p^*$ . Čia gauname svarbią išvadą, kad akceptorinių priemaišų  $e$ - $A$  sugerties spektras yra daug labiau išplitęs nei donorinių priemaišų  $D$ - $h$  sugerties spektras.



23 pav. Apskaičiuoti (a)  $e$ - $A$  ir (b)  $D$ - $h$  šuolių sugerties koeficientai, keičiantis dimensijai  $\alpha$ . Energijos skalė yra santykinė, perstumta per kvantinio šulinio draudžiamosios energijos tarpą ir dvigubą priemaišos jonizacijos energiją. Spektrai normuoti į vienetą.

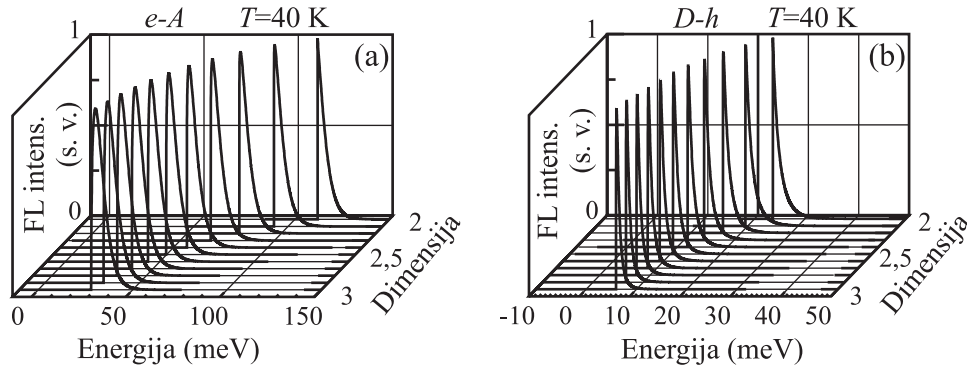
Priemaišų rekombinacijos spektras randamas pasinaudojus (3.12) lygtimi. Šiuo atveju funkcija  $f(E)$  yra krūvininkų (elektronų) Fermi-Dirac pasiskirstymo funkcija

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{\hbar\omega - E_g + E_I - E_F}{k_B T}}}; \quad (3.29)$$

čia  $E_I$  – priemaišų jonizacijos energija,  $E_F$  – kvazi Fermi lygmens energija atskaitoma nuo juostos krašto. Akceptorinių ir donorų rekombinacijos spektrų 40 K temperatūroje priklausomybė nuo dimensijos  $\alpha$  pateikta 24 (a, b) pav. Skaičiuojant tarta, kad Fermi energija  $E_F = 0$ .

Akceptorinių rekombinacijos 40 K temperatūroje kreivės plotis pusės aukštyje yra apie penkis kartus didesnis negu donorų atveju. Kintant temperatūrai, kreivės išplinta nevienodai. 3,6 K temperatūroje šių kreivių plokčių santykis yra apie du. Skystojo azoto ir aukštesnėje temperatūroje visi sekieji donoriai yra jonizuoti ir nebėra prasmės kalbėti apie  $D$ - $h$  spinduliuotę.

Iš viso to kas nagrinėta, svarbiausia yra tai, kad spinduliuotės linija yra asimetrinė. Linijos priekinė dalis yra artimesnė laipteliui, tačiau didesniųjų energijų sritį lemia pasiskirstymo funkcijos eksponentinė dalis. Donorinėms priemaišoms eksponentinė dalis nėra tokia svarbi kaip akceptoriams.

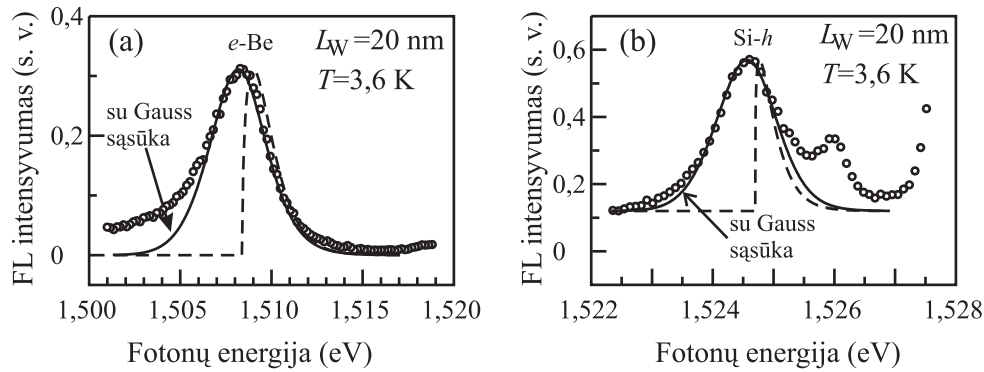


**24 pav.** Apskaičiuotos **(a)**  $e-A$  ir **(b)**  $D-h$  šuolių FL spektrų kreivės skirtingoms dimensijos vėrtėms esant 40 K temperatūrai. Energijos skalė yra santykinė, perstumta per kvantinio šulinio draudžiamosios energijos tarpą ir dvigubą priemaišos jonizacijos energiją. Spektrai normuoti į vienetą.

Norint pilnai aprašyti eksperimentiškai stebimą priemaišinės spinduliuotės spektrą, reikia taikyti Gauss sąsūką, kad įskaitytume atsitiktinį priemaišų pasiskirstymą  $\delta$  sluoksnyje. Darbe [S2] parodėme, kad šis modelis gerai aprašo 10 ir 15 nm pločio kvantinių šulinių, legiruotų akceptorinėmis priemaišomis, eksperimentinius rezultatus esant 77 K temperatūrai.

Čia papildomai pateiksime visiškai naujus rezultatus. 25 paveiksle pavaizduoti eksperimentiniai ir teoriniai Be ir Si priemaišų rekombinacijos spektrai 20 nm pločio kvantiniuose šuliniuose esant 3,6 K temperatūrai. Akceptoriams, kurių  $E_A = 29$  meV, rasta dimensija pagal (3.25) lygtį lygi  $\alpha = 2,96$ , o donorams, kurių  $E_D = 11,6$  meV, dimensija lygi  $\alpha = 2,42$ . Tai natūralu, kad donorams dimensijos parametras labiau skiriasi nuo trejeto, nes yra didesnis Bohr spindulys ir stipriau įtakoja kvantinio šulinio matmenys. Sąsūkai naudotas Gauss kreivės visas plotis pusės maksimumo aukštyje akceptoriams yra  $w_G = 5$  meV ir donorams –  $w_G = 1,5$  meV. Akivaizdu, kad be Gauss sąsūkos galima aprašyti tik didesniųjų energijų pusę, tuo tarpu

mažesniųjų energijų pusėje lieka „laiptelis“. Tai rodo, kad mažesniųjų energijų pusėje spinduliuotės linijos išplitimą lemia priemaišų atsitiktinis išsibarstymas gardelėje. Geresnei  $e$ -Be smailės taškų aproksimacijai (25 (a) pav.) pasiskirstymo funkcijoje buvo parinkta 10 K temperatūra. Tai rodo, kad tikroji rekombinuojančių laisvųjų krūvininkų temperatūrą yra didesnė už bandinio gardelės temperatūrą. Šis reiškinys yra susijęs su laisvųjų krūvininkų kaitimu.



**25 pav.** Priemaišinės spinduliuotės teorinė analizė  $L_W = 20$  nm pločio GaAs/AlAs kvantiniuose šuliniuose  $\delta$ -legiruotuose (a) akceptorine Be priemaiša ( $N_{Be} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ ) ir (b) donorine Si priemaiša ( $N_{Si} = 4 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ) esant 3,6 K temperatūrai. Taškai yra eksperimentiniai duomenys, linijos – teoriniai skaičiavimai.

### 3.4 Trečiojo skyriaus išvados

1. Iš fotoluminescencijos spektrų aptikta priemaišų įtaka GaAs/AlAs kvantinių šulinių savitajai spinduliuotei. Ji pasireiškia formuojant nehomogeninę linijos išplitimo dalį.
2. Nustatytos GaAs/AlAs kvantinių šulinių surišųjų eksitonų su Be akceptoriais ir Si donorais jonizacijos energijos. Jos yra maždaug du kartus didesnės nei tūriniame GaAs.
3. Rastos akceptorių ir donorų jonizacijos energijos, esant įvairiems GaAs/AlAs kvantinių šulinių pločiams.  $E_A = 29\text{--}42 \text{ meV}$ , kai  $L_W = 20\text{--}5 \text{ nm}$ , ir  $E_D = 11,6 \text{ meV}$ , kai  $L_W = 20 \text{ nm}$ .
4. Eksperimentiškai ir teoriškai parodėme, kad priemaišinės spinduliuotės spektras yra asimetris. Asimetriškumas labiau pasireiškia

akceptorinėms nei donorinėms priemaišoms ir jis didėja aukštesnėse temperatūrose. Tai susiję su platesniu akceptorinių sugerties spektru.

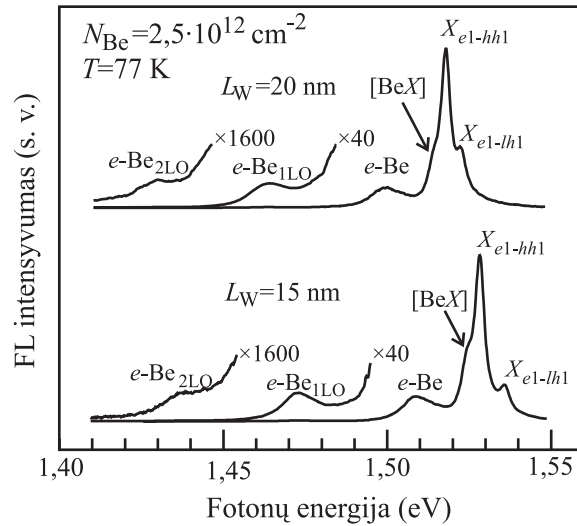
5. Akceptorinėmis Be priemaišomis legiruoti GaAs/AlAs kvantiniai šuliniai gali būti panaudoti kuriant terahercų srities emiterius ir jutiklius. Keičiant kvantinių šulinių plotį, akceptorinių priemaišinių lygmenų energiją galima keisti nuo 28 meV iki 45 meV arba dažnį nuo 6,8 THz iki 10,9 THz.

## 4 SPINDULIUOTĖS TĄSA GaAs/AlAs KVANTINIŲ ŠULINIŲ SPEKTRUOSE

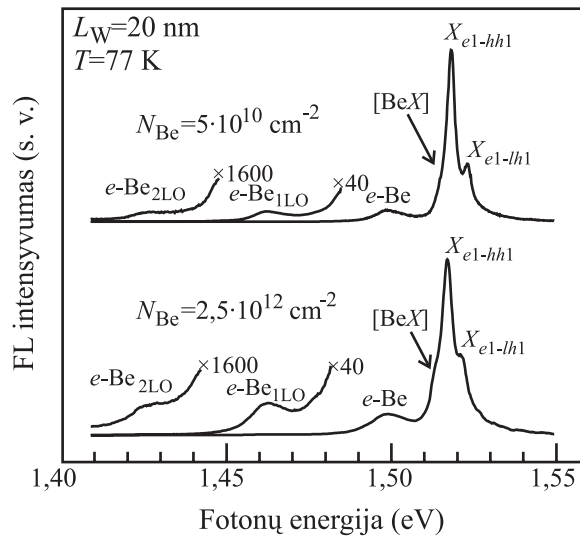
Laisvųjų krūvininkų, priemaišų ir eksitonų sąveika su fononais yra svarbi nagrinėjant kvantinių šulinių fizikines savybes, kadangi ši sąveika gali labai pakeisti jų elektrines ir optines savybes. Pavyzdžiui, elektronų ir išilginių optinių (LO) fononų sąveika sukuria poliaroninį reiškinį, kuris pakeičia priemaišos jonizacijos energiją bei laisvųjų krūvininkų efektyvią masę [124, 125]. Tačiau GaAs/AlAs dariniuose šis reiškinys nėra labai svarbus. Taip pat sąveika su optiniais fononais yra FL spektruose stebimų su priemaišomis surišėtų eksitonų fononinių replikų priežastis [126]. Puslaidininkų FL spektruose daugiausia nagrinėtos laisvųjų krūvininkų ir priemaišas šuolių fononinės replikos. Mes atradome ir tyrėme fononines replikas Be  $\delta$ -legiruotose GaAs/AlAs kvantiniuose šuliniuose nuo 3,6 K iki skystojo azoto temperatūros. Tyrimo rezultatai ir teorinės analizės modelis paskelbti [S3, S5] darbuose. *n*-tipo GaAs/AlAs kvantinių šulinių spinduliuotės tąsos spektre, esant didesniems Si legiravimo tankiams, stebėta nauja priemaišinė juosta [S4].

### 4.1 Fononinės replikos Be $\delta$ -legiruotuose GaAs/AlAs kvantiniuose šuliniuose

Ištyrėme GaAs/AlAs kvantinių šulinių FL spektrus žymiai platesniame intervale ir mažesniųjų energijų pusę. Teko pasiekti didelį fotonų skaičiavimo jautrį bei perdengti platų intensyvumo diapazoną iki penkių eilių. Dviejų Be  $\delta$ -legiruotų  $N_{\text{Be}} = 2,5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  GaAs/AlAs kartotinių  $L_w = 15$  ir 20 nm pločio kvantinių šulinių FL spektrai, esant skystojo azoto temperatūrai, pavaizduoti 26 paveiksle. Kaip matyti, be intensyviausių FL linijų, susijusių su kvantinio šulinio eksitonine ir priemaišine *e*-Be spinduliuotėmis, stebimos dar dvi mažiau intensyvios spektrinės linijos, kurias pažymėjome *e*-Be<sub>1LO</sub> ir *e*-Be<sub>2LO</sub>. Norėdami išsiaiškinti šių spektrinių linijų prigimtį ir ypatumus pirmiausia ištyrėme priemaišų tankio ir žadinančios šviesos intensyvumo įtaką FL spektrams.



**26 pav.** Be  $\delta$ -legiruoatų  $N_{\text{Be}} = 2,5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  kartotinių  $L_{\text{W}} = 15$  ir  $20 \text{ nm}$  pločio GaAs/AlAs kvantinių šulinių FL spektrai esant skystojo azoto temperatūrai.  $e\text{-Be}_{1\text{LO}}$  ir  $e\text{-Be}_{2\text{LO}}$  žymi priemaišinės spinduliuotės pirmąją ir antrąją fononines replikas, kurios atitinkamai padidintos 40 ir 1600 kartų. Kiti žymėjimai atitinka 15 pav.



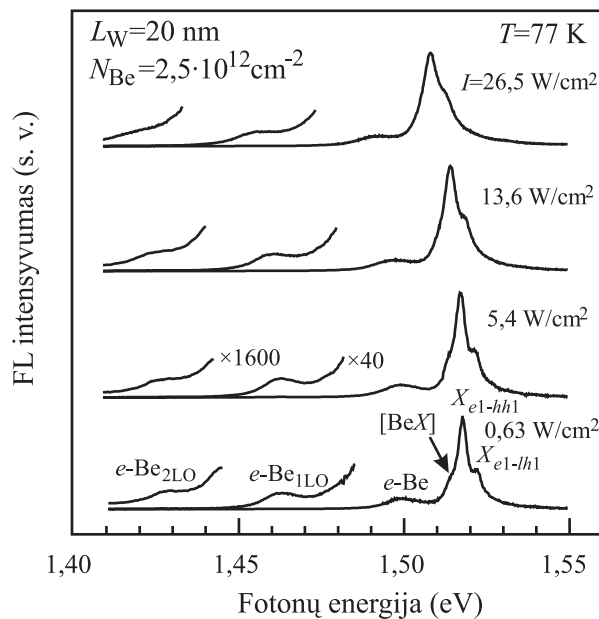
**27 pav.**  $L_{\text{W}} = 20 \text{ nm}$  pločio GaAs/AlAs kartotinių kvantinių šulinių Be  $\delta$ -legiruoatų  $N_{\text{Be}} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  ir  $2,5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  FL spektrai skystojo azoto temperatūroje.

**Priklausomybė nuo priemaišų tankio.** 27 paveiksle pavaizduoti  $L_{\text{W}} = 20 \text{ nm}$  pločio GaAs/AlAs kvantinių šulinių su skirtingais Be priemaišų  $N_{\text{Be}} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  ir  $2,5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  tankiais FL spektrai esant skystojo azoto temperatūrai. Akivaizdu, kad, esant vidutiniam legiravimui, nuo priemaišų



tankio nekinta  $e\text{-Be}_{1\text{LO}}$  ir  $e\text{-Be}_{2\text{LO}}$  linijų padėtis. Padidėjus priemaišų tankiui jų intensyvumas išauga proporcingai  $e\text{-Be}$  linijos intensyvumui. Tad galima manyti kad šios spinduliuotės yra tarpusavyje susijusios.

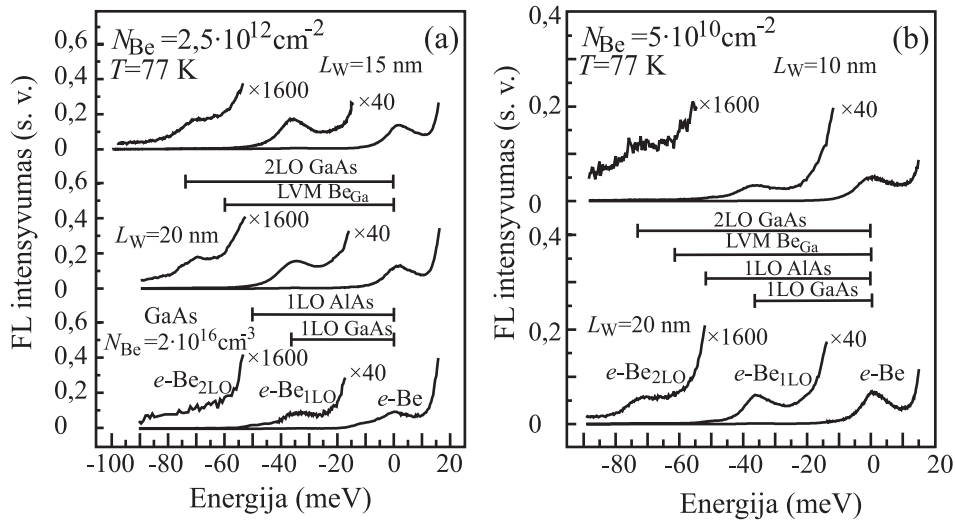
**Priklausomybė nuo žadinančios šviesos intensyvumo.** Tyrimo rezultatai nuo žadinančios šviesos intensyvumo vieno iš bandinių pateikti 28 paveiksle. Buvo pastebėta, kad, esant šviesos intensyvumui iki  $15 \text{ W/cm}^2$ , santykinis linijų intensyvumas ir energinė padėtis nekinta. Esant didesniai, pavyzdžiui,  $26,5 \text{ W/cm}^2$  intensyvumui, visos FL spektro linijos pasislenka kelis meV į žemesniųjų energijų pusę ir išplinta. Tačiau atstumai tarp linijų nepakinta. Poslinkį galima paaiškinti ekranavimu laisvaisiais krūvininkais, kuris yra stipresnis esant dideliems žadinimo intensyvumams. Tad tolimesni tyrimai buvo atlikti esant tokiems žadinimo intensyvumams, kai šviesos sugeneruoti krūvininkai iš esmės nekeičia linijų padėties ir formos.



**28 pav.** Be  $\delta$ -legiruotų  $N_{\text{Be}} = 2,5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  GaAs/AlAs kartotinių kvantinių šulinių  $L_{\text{W}} = 20 \text{ nm}$  FL spektrai esant skystojo azoto temperatūrai ir įvairiems žadinančios šviesos intensyvumams. Simboliai yra kaip ir 26 pav.

**Priklausomybė nuo kvantinio šulinio pločio.** Fotoluminescencijos spektro linijų padėtis nuo kvantinio šulinio pločio, esant dviems legiravimo tankiams  $N_{\text{Be}} = 2,5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  ir  $N_{\text{Be}} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ , pavaizduota atitinkamai 29 (a)

ir 29 (b) paveiksluose. Dėl vaizdumo santykinė energijos skalė sutapatinta su  $e$ -Be linijos maksimumu. Įdomiausia tai, kad stebimų trijų linijų padėtis nepriklauso nuo kvantinio šulinio pločio. Dar įdomiau, kad šių linijų santykinė padėtis sutampa su tūrinio GaAs  $N_{\text{Be}} = 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  FL spektru (29 (a) pav.). Iš to darome dvi išvadas. Pirmoji, papildomos linijos  $e$ -Be<sub>1LO</sub> ir  $e$ -Be<sub>2LO</sub> yra priemaišinės  $e$ -Be spinduliuotės fononinės replikos. Ir antroji, fononinės replikos yra nutolusios per GaAs kvantinio šulinio LO fonono energiją, kuri sutampa su tūrinio kristalo LO fonono energija.



**29 pav.** FL spektrai skystojo azoto temperatūroje: **(a)** Be legiruoto  $N_{\text{Be}} = 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  tūrinio GaAs ir Be  $\delta$ -legiruotų  $N_{\text{Be}} = 2,5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  GaAs/AlAs  $L_w = 15$  ir  $20$  nm pločio kartotinių kvantinių šulinių; **(b)** Be  $\delta$ -legiruotų  $N_{\text{Be}} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  GaAs/AlAs  $L_w = 10$  ir  $20$  nm pločio kartotinių kvantinių šulinių. Energijos skalė sutapatinta su  $e$ -Be linijos maksimumu. Atkarpos žymi: 1LO GaAs – GaAs LO fonono energija, 1LO AlAs – AlAs LO fonono energija, LVM Be<sub>Ga</sub> – Be priemaišų lokaliųjų virpesių modos energija ir 2LO GaAs – dvigubą GaAs LO fonono energija.

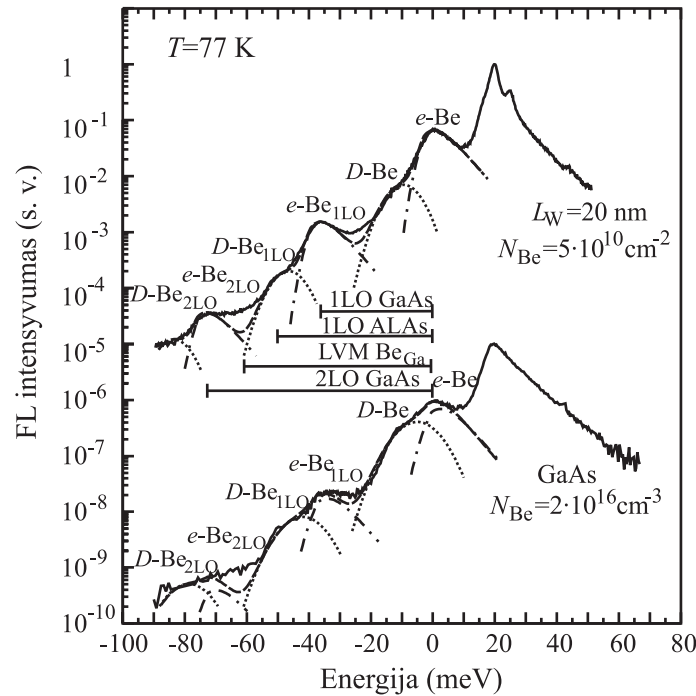
Žinoma, kad GaAs yra polinė medžiaga ir todėl joje krūvininkai stipriai sąveikauja su LO fononais. Kvazi dvimačiuose puslaidininkiniuose dariniuose fononų modos yra daug sudėtingesnės palyginus su tūriniais kristalais. Erdvės apribojimas dariniuose keičia įprastines išilginių optinių fononų modas formuodamas apribotas LO fononų modas [127, 128]. Sandūra gali sukurti vadinamuosius sandūros optinius fononus [129, 130]. Taip pat krūvininkai gali sąveikauti ir su barjero LO fononais. Esant tam tikroms fotoluminescencijos

žadavimo sąlygoms, gali atsirasti spektre linija susijusi su priemaišų lokaliųjų virpesių moda (LVM) [131]. Mūsų tirtų kvantinių šulinių plotis yra gana didelis, kad būtų galima aiškiai stebėti apribotas suskilusias LO fononų modas ir sandūros fononus. 29 ir 30 paveiksluose atkarpomis pavaizduota GaAs LO fonono energija  $\hbar\omega_{1LO}(\text{GaAs}) = 36,75 \text{ meV}$  [132] ir dviguba LO fonono energija  $\hbar\omega_{2LO}(\text{GaAs}) = 73,5 \text{ meV}$ , AlAs LO fonono energija  $\hbar\omega_{1LO}(\text{AlAs}) = 50 \text{ meV}$  [133] ir Be priemaišų lokaliųjų virpesių modos energija  $\hbar\omega_{LVM}(\text{Be}_{\text{Ga}}) = 57,76 \text{ meV}$  [134]. Aiškiai matyti, kad priemaišinės spinduliuotės  $e$ -Be replikų padėtis sutampa su GaAs 1LO ir 2LO fononų energijomis.

Tiriant Raman ir karštųjų elektronų su neutraliaisiais akceptoriais rekombinaciją fotoluminescencijos metodais buvo nustatyta, kad elektronai labiausiai sąveikauja su „tūriniais“ GaAs kvantinio šulinio LO fononais [135]. Taip pat šiame darbe buvo stebėta ir sąveika su barjero fononais. Tačiau mes nestebėjome sąveikos su barjero LO fononais. Todėl manome, kad sąveika su barjero fononais nėra svarbi krūvininkams esantiems arti pusiausvyros būsenos.

Iš tūrinio GaAs kristalo ir  $L_w = 20 \text{ nm}$  pločio GaAs/AlAs kvantinio šulinio eksperimentinių rezultatų, pavaizduotų pusiau logaritminėje skalėje 30 pav., galima akivaizdžiau stebėti linijų intensyvumo kitimą labai plačiame intensyvumų diapazone. Taip pat galima pastebėti, kad tarp  $e$ -Be 1LO ir 2LO fononinių replikų yra vingis, kurio energija yra arti AlAs LO fonono energijos. Šis vingis būdingas ir tūriniam GaAs kristalui (žr. 30 pav. ir [136]). Todėl galima atmesti prielaidą, kad tai yra AlAs barjero LO fonono replika. Jį galima susieti su liekamųjų donorų-Be akceptorinių spinduliuotės GaAs 1LO fononine replika. Kadangi kvantiniai šuliniai auginti tomis pačiomis sąlygomis iš tų pačių medžiagų kaip ir GaAs kristalas, tai galima tikėtis panašių liekamųjų priemaišų tankių GaAs bandinyje ir kvantiniuose šuliniuose. Liekamasis donoras-Be akceptorius rekombinacija, kuri 30 pav. pažymėta  $D$ -Be spinduliuote, aiškiai matoma tūriniame GaAs šalia  $e$ -Be priemaišinės spinduliuotės. Kvantiniuose šuliniuose  $D$ -Be spinduliuotės linija yra kelis meV

paslinkusi į mažesniųjų energijų pusę, kadangi dėl apribojimo kvantiniuose šuliniuose padidėja donorų jonizacijos energija. Tačiau atstumas tarp  $D$ -Be spinduliuotės ir jos fononinės replikos  $D$ -Be<sub>1LO</sub> linijų kvantiniame šulinyje ir tūriniame GaAs kristale yra vienodas ir lygus GaAs optinio fonono energijai. Tai rodo, kad ir kvantiniame šulinyje fononines replikas  $D$ -Be<sub>1LO</sub> ir  $D$ -Be<sub>2LO</sub> sukuria kvantinio šulinio GaAs LO fononai.



**30 pav.** Santykinė FL spektro linijų padėtis Be legiruoto tūrinio GaAs  $N_{\text{Be}} = 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  ir Be  $\delta$ -legiruotų  $N_{\text{Be}} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  GaAs/AlAs kartotinių kvantinių šulinių  $L_W = 20 \text{ nm}$  esant skystojo azoto temperatūrai. Energijos skalė sutapatinta su  $e$ -Be smailės maksimumu. Ištinė linija yra eksperimentiniai rezultatai, o kitos linijos žymi teorinius skaičiavimus: brūkšny-taškas linija yra  $e$ -Be šuoliai ir jų fononinės replikos, taškinė linija vaizduoja  $D$ -Be šuolius ir jų fononinės replikas, o brūkšninė linija yra priemaišinės spinduliuotės suminis spektras.

Aptartas modelis pagrįstas teoriškai apskaičiavus priemaišinės spinduliuotės  $e$ -Be kreives, kurios 30 pav. pavaizduotos brūkšny-taškas linijomis, remiantis anksčiau aptartu trupmeninės dimensijos erdvės modeliu. Fononinių replikų spinduliuotės apskaičiuotos tariant, kad linijos pasislenka per išilginio optinio fonono energiją, jų intensyvumas sumažėja, o pavidalas nepakinta.  $D$ -Be rekombinacija ir jos fononinės replikos aprašytos Gauss

pavidalo kreivėmis (30 pav. taškinės linijos). Donoras-akceptorius rekombinacija priklauso nuo donoro ir akceptorius banginių funkcijų sandaugos, kuri eksponentiškai priklauso nuo atstumo tarp donoro ir akceptorius ir yra susijusi su išspinduliuoto fotono energija. Tad  $D-A$  šuoliai gali būti aproksimuojami Gauss funkcija [137]. Nežymus neatitikimas tarp eksperimento rezultatų ir teorinių skaičiavimų (brūkšninė linija) gali būti susijęs su tuo, kad buvo įskaityta tik sąveika su „tūriniu“ LO fononu GaAs kvantiniuose šuliniuose. Iš tikrųjų sąveika yra sudėtingesnė. Mūsų eksperimentuose neišryškėja priemaišų lokaliųjų virpesių moda. Tikėtina kad ją slepia fononinės replikos. LVM skaičius proporcingas priemaišinių atomų tankiui, kuris yra daug mažesnis nei pagrindinės medžiagos atomų tankis. Iš viso to seka, kad Be  $\delta$ -legiruotuose kvantiniuose šuliniuose stebėtos papildomos spinduliuotės kreivės mažesniųjų energijų srityje yra susijusios su priemaišinės spinduliuotės išilginio optinio fonono fononinėmis replikomis.

#### **4.2 Be $\delta$ -legiruotų GaAs/AlAs kvantinių šulinių Huang-Rhys faktorius**

Dabar aptarsime fononinių replikų intensyvumą. Pagrindinės spinduliuotės linijos ir jos fononinių replikų intensyvumo pasiskirstymas apibūdinamas Huang-Rhys faktoriumi  $S$  [138]. Eksperimentinė vertė randama iš linijų intensyvumo pasiskirstymo:

$$I_p = \frac{S^p}{p!} e^{-S}; \quad (4.1)$$

čia  $I_p$  –  $p$ -tosios fononinės replikos intensyvumas,  $p = 0, 1, 2, \dots, n$ .  $p$ -tosios fononinės replikos intensyvumas  $I_p$  gali būti išreikštas per pagrindinės linijos intensyvumą  $I_0$ :

$$I_p = I_0 \frac{S^p}{p!}. \quad (4.2)$$

Pastebėta, kad iš santykio tarp pirmosios replikos ir pagrindinės spinduliuotės intensyvumų  $I_{1LO}/I_0$  nustatoma netiksli Huang-Rhys faktoriaus vertė, kuri dažniausiai būna mažesnė už tikrąją vertę [126, 139]. Šis faktas buvo nustatytas eksperimentiškai ir taip pat pasitvirtino mūsų eksperimentuose. Daug tikslesnė Huang-Rhys faktoriaus vertė gaunama iš tolimesniųjų replikų, pavyzdžiui, iš  $I_{2LO}/I_{1LO}$  antrosios su pirmąja fononinių replikų santykio

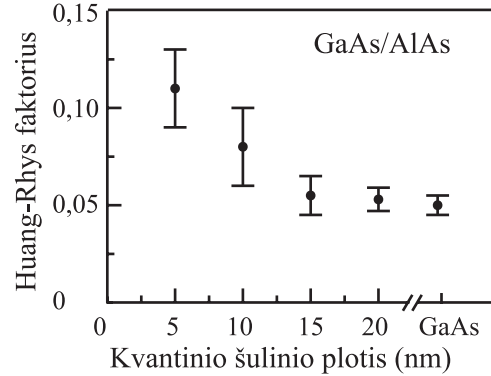
$$S = 2 \frac{I_{2LO}}{I_{1LO}}. \quad (4.3)$$

Išspinduliuoto fotono energija dalyvaujant fononui lygi

$$h\nu = E_0 - p\hbar\omega_{LO}; \quad (4.4)$$

čia  $E_0$  yra pagrindinės linijos energija,  $p$  rodo dalyvaujančių fononų skaičių vyksme ir  $\hbar\omega_{LO}$  yra fonono energija.

Pagal (4.3) formulę rastosios eksperimentinės Huang-Rhys faktoriaus vertės pavaizduotos 31 paveiksle. Matome, kad jis priklauso nuo kvantinio šulinio pločio. Siaurėjant kvantiniams šuliniams, Huang-Rhys faktoriaus vertė didėja. Tai reiškia, kad stiprėja LO fononų įtaka priemaišinei spinduliuotei. Platiems kvantiniams šuliniams *e*-Be šuolių eksperimentinė Huang-Rhys faktoriaus vertė  $S \approx 0,052$  ir artima tūrinio GaAs vertei  $S = 0,05$  rastai anglies *e*-C priemaišinei spinduliuotei [136].



**31 pav.** Eksperimentinės Huang-Rhys faktoriaus vertės Be  $\delta$ -legiruotuose GaAs/AlAs kvantiniuose šuliniuose. Atkarpos žymi eksperimentinių rezultatų sklaidą.

Teoriškai Huang-Rhys faktorių apskaičiavome remiantis anksčiau pristatytu TDE modeliu. Prieš tai padarysime prielaidą, kad kvantiniame

šulinyje sąveika vyksta su tūrinio tipo išilginiais optiniais fononais. Tai parodė ir mūsų eksperimentiniai rezultatai. Panaudojus adiabatiniį artinį ir Frölich sąveikos teoriją [137, 140], Huang-Rhys faktorius užrašomas išraiška

$$S_\alpha = \sum_q \frac{|V_q^\alpha|^2}{(\hbar\omega_{LO})^2} |\rho_q^\alpha|^2; \quad (4.5)$$

čia  $q$  – bangos vektorius,  $\hbar\omega_{LO}$  – LO fonono energija, o  $\rho_q^\alpha$  – krūvio pasiskirstymo Fourier transformacija. Indeksas  $\alpha$  rodo, kad modelis nagrinėjamas  $\alpha D$  erdvėje.

Laisvųjų krūvininkų ir fononų sąveikos stiprio kvadratas TDE modelio rėmuose pagal Matos-Abiague [125] lygus

$$|V_q^\alpha|^2 = \frac{\Gamma\left(\frac{\alpha-1}{2}\right)(4\pi)^{\frac{\alpha-1}{2}}}{\Omega_\alpha} \eta \frac{(\hbar\omega_{LO})^2}{q^{\alpha-1}} \left(\frac{\hbar}{2m^*\omega_{LO}}\right)^{\frac{1}{2}}; \quad (4.6)$$

čia  $m^*$  yra laisvojo krūvininko efektinė masė,  $\Omega_\alpha$  – trupmeninės erdvės tūris,  $\eta$  yra Frölich pastovioji, kuri lygi

$$\eta = \left(\frac{2m^*\omega_{LO}}{\hbar}\right)^{1/2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 2\hbar\omega_{LO}} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s}\right). \quad (4.7)$$

$\epsilon_\infty$  ir  $\epsilon_s$  yra atitinkamai aukštojo dažnio ir statinė dielektrinės skvarbos,  $\epsilon_0$  – elektrinė pastovioji.

Skaičiuojant (4.5) lygtyje, diskretinė suma keičiama erdviniu integralu pagal sąryšį [125]

$$\sum_q \rightarrow \frac{\Omega_\alpha}{(2\pi)^\alpha} \frac{2\pi^{(\alpha-1)/2}}{\Gamma\left[\frac{\alpha-1}{2}\right]_{\alpha D}} \int q^{\alpha-1} (\sin\theta)^{\alpha-2} dq d\theta. \quad (4.8)$$

Pasinaudojus (4.6)–(4.8) lygtimis gauname

$$S_\alpha = \frac{\Gamma\left[\frac{\alpha-1}{2}\right]}{\Gamma\left[\frac{\alpha}{2}\right] \pi^{1/2}} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 2\hbar\omega_{LO}} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s}\right) \int_0^\infty |\rho_q^\alpha|^2 dq. \quad (4.9)$$

Priemaišų krūvio tankio Fourier transformacija [137, 140] lygi

$$\rho_q^\alpha = \int d\vec{r} |F(\vec{r})|^2 e^{i\vec{q}\vec{r}}; \quad (4.10)$$

čia  $F(\vec{r})$  yra priemaišos vandenilio tipo banginė funkcija TDE modelyje (žr. (3.21) lygtį). Priemaišų krūvio tankio Fourier transformacija TDE modelyje apskaičiuojama pagal lygtį [114]

$$\rho_q^\alpha = (2\pi)^{\alpha/2} \int_0^\infty r^{\alpha-1} (qr)^{1-\alpha/2} J_{\alpha/2-1}(qr) |F(r)|^2 dr; \quad (4.11)$$

čia  $J_{\alpha/2-1}$  yra Bessel funkcija. Apskaičiuojant Fourier transformaciją, randame tankio kvadratą, kuris lygus

$$|\rho_q^\alpha|^2 = \frac{1}{\left[1 + a_0^2 q^2 \left(\frac{\alpha-1}{4}\right)^2\right]^{\alpha+1}}. \quad (4.12)$$

Ir iš (4.9) lygties apskaičiuojame trupmeninių dimensijų erdvės modelyje Huang-Rhys faktorių, kuris lygus

$$S_\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar\omega_{LO}} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s}\right) \frac{\Gamma\left[\frac{\alpha-1}{2}\right] \Gamma\left[\frac{1}{2} + \alpha\right]}{\Gamma[1+\alpha] \Gamma\left[\frac{\alpha}{2}\right]} \frac{1}{a_0(\alpha-1)}. \quad (4.13)$$

Trimačiu  $\alpha = 3$  atveju iš (4.13) lygties Huang-Rhys faktorius lygus

$$S_3 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar\omega_{LO}} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s}\right) \frac{5}{16a_0}. \quad (4.14)$$



Ši išraiška yra gerai žinoma Huang-Rhys faktoriaus lygtis vandenilio tipo priemaišoms tūriniam puslaidininkyje [141]. Dvimačiu 2D atveju Huang-Rhys faktoriaus matematinė išraiška įgyja pavidalą

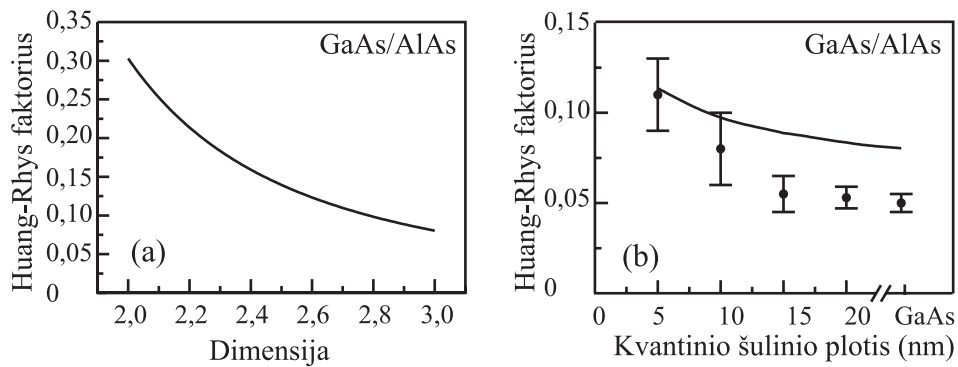
$$S_2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar\omega_{LO}} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \frac{3\pi}{8a_0}. \quad (4.15)$$

Santykis tarp 2D ir 3D verčių lygus

$$S_2 / S_3 = 6\pi/5 \approx 3,77. \quad (4.16)$$

Tai rodo, kad dvimačiuose dariniuose fononinė sąveika yra stipresnė nei tūrinuose kristaluose. Tai yra susiję ne su fononinio spektro transformacija, bet su krūvininkų apribojimu potenciniais barjeriais bei banginės funkcijos pasikeitimu kvantiniame šulinyje.

Huang-Rhys faktoriaus priklausomybė nuo dimensijos  $\alpha$  pavaizduota 32 (a) paveiksle. Skaičiavimams naudoti GaAs parametrai  $\epsilon_\infty = 10,67$  ir  $\epsilon_s = 12,51$  [18],  $\hbar\omega_{LO}(\text{GaAs}) = 36,75$  meV ir 3D atveju Be priemaišos, kai jonizacijos energija  $E_{Be} = 28$  meV, Bohr spindulys  $a_0 = 2,1$  nm. Žinant eksperimentines akseptorių jonizacijos energijas (žr. 6 lent.) ir pagal (3.25) lygtį radus dimensiją, apskaičiuota Huang-Rhys faktoriaus priklausomybė nuo kvantinio šulinio pločio pavaizduota 32 (b) pav. ištisine linija. Nedidelis



**32 pav. (a)** Huang-Rhys faktoriaus priklausomybė nuo dimensijos; **(b)** GaAs/AlAs kvantinių šulinių legiruotų Be priemaišomis Huang-Rhys faktoriaus priklausomybė nuo kvantinio šulinio pločio. Taškai žymi eksperimentinius rezultatus, ištisinė kreivė – teorinius skaičiavimus.

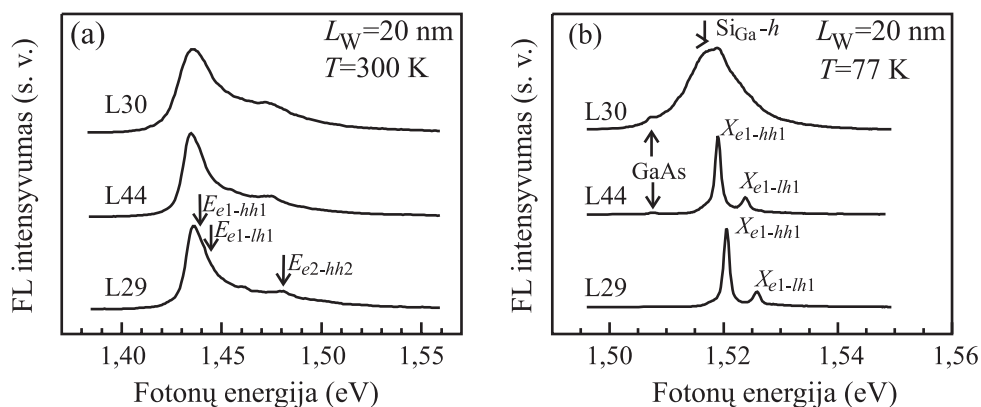
skirtumas tarp eksperimentinių ir teorinių verčių greičiausiai susijęs su tuo, kad akceptoriams nagrinėti naudotas supaprastintas vandenilio tipo sferinės simetrijos modelis. Siaurėjant kvantiniams šuliniams apskaičiuotas Huang-Rhys faktorius didėja. Galima pažymėti, kad šio faktoriaus didėjimas gali būti sumažintas banginių funkcijų išsiskverbimo į barjerus, kuris labai svarbus siauriems kvantiniams šuliniams.

Šiuo paprastu modeliu išnagrinėjome sąveiką su tūriniais fononais. Todėl šis modelis gali būti nepakankamai tikslus siauriems kvantiniams šuliniams, kai optinių fononų apribojimas barjeriais tampa svarbus. Galime pažymėti, kad Huang-Rhys faktoriaus trupmeninės dimensijos erdvėje savybių analizė padėjo suprasti realioje fizikinėje sistemoje vykstančius procesus ir padaryti išvadą. Fononinė sąveika yra stipresnė kvantiniuose šuliniuose nei tūrinuose kristaluose dėl krūvininkų apribojimo potenciniais barjeriais bei banginės funkcijos pasikeitimo kvantiniame šulinyje.

### ***4.3 Donorinė Si priemaiša legiruotų bandinių fotoluminescencijos juosta***

Čia pateiksime tyrimus GaAs/AlAs kvantinių šulinių legiruotų donorine Si priemaiša iki dielektrikas-metalas Mott virsmo. Siliciu  $\delta$ -legiruotų bandinių, esant skirtingam priemaišų tankiui, savitosios spinduliuotės FL spektrai kambario ir skystojo azoto temperatūrose parodyti 33 paveiksle. FL spektruose stebimos kelios ryškios smailės. Nelegiruotų ir silpnai Si legiruotų bandinių spektruose, esant kambario temperatūrai,  $X_{e1-hh1}$  sunkiųjų ir  $X_{e1-lh1}$  lengvųjų skylių eksitoninių spinduliuočių smailės persikloja. Tuo tarpu skystojo azoto temperatūroje šių spinduliuočių smailės atsiskiria ir duoda didžiausią įnašą į FL spektrą.

Stipriau Si legiruotuose bandiniuose stebimas kitoks FL spektras, kurio sudėtis aiškiau išreikšta esant skystojo azoto temperatūrai. Spektre išnyksta smulkioji eksitoninė sandara ir spinduliuotės maksimumas pasislinkęs į mažesniųjų energijų pusę. Manome, kad spinduliuotės maksimumas yra susijęs su nauja spinduliuotės juosta, kuri pažymėta  $Si_{Ga}-h$ . Tai yra elektronų

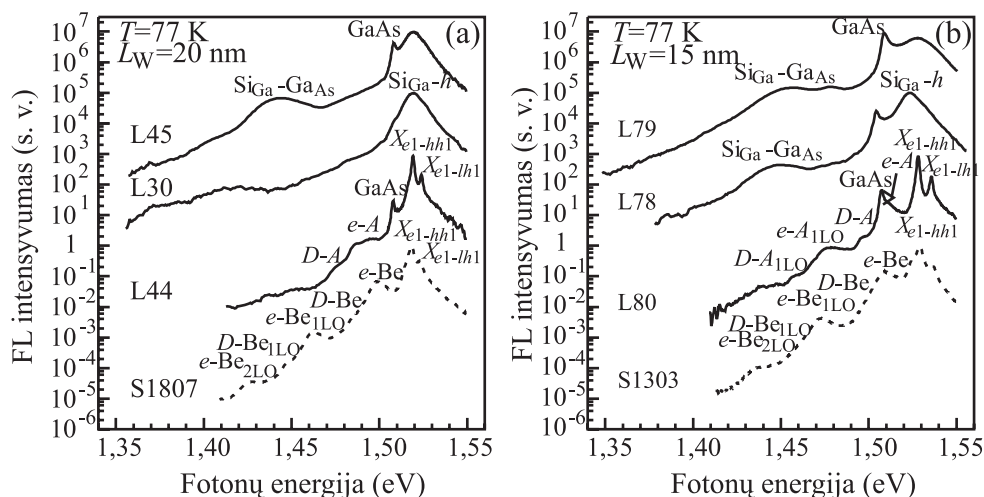


**33 pav.** Si  $\delta$ -legiruotų kartotinių GaAs/AlAs kvantinių šulinių, kurių plotis  $L_w = 20$  nm ir  $N_{Si} = 1,4 \cdot 10^{11}$  cm $^{-2}$  (L30),  $1 \cdot 10^{10}$  cm $^{-2}$  (L44) ir  $4 \cdot 10^9$  cm $^{-2}$  (L29), savitosios FL spinduliuotės spektrai esant **(a)** kambario ir **(b)** skystojo azoto temperatūroms. Spektrai yra normuoti ir perstumti vertikaliajoje skaleje. Si $_{Ga-h}$  pažymėtas Si donoras-laisvoji skylė šuolis, o užrašas GaAs žymi spinduliuotę iš buferinio GaAs sluoksnio. Kitų žymėjimų prasmė nurodyta 15 pav.

rekombinacija per Si donorinius lygmenis su laisvosiomis skylėmis. Taip pat šių bandinių spektruose didesniųjų energijų srityje stebimi kreivės polinkiai, kurie sutampa su sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitonine spinduliuote nelegiruotuose ar silpnai legiruotuose bandiniuose. Galima teigti, kad spektras susideda iš savitosios eksitoninės ir priemaišinės spinduliuotės, tik dėl priemaišų gausumo šios juostos yra susiliejusios. Panašūs FL spektrai buvo gauti ir Si  $\delta$ -legiruotiems  $L_w = 15$  nm pločio GaAs/AlAs kvantiniams šuliniams, kurie aptarti darbe [S4].

Siliciu  $\delta$ -legiruotų  $L_w = 20$  ir  $15$  nm pločio kvantinių šulinių FL spektro tąsa mažesniųjų energijų srityje, esant skystojo azoto temperatūrai, pavaizduota atitinkamai 34 (a) ir 34 (b) paveiksluose. Palyginimui brūkšninėmis linijomis atidėti akceptorinėmis Be priemaišomis  $\delta$ -legiruotų bandinių FL spektrai, kurie buvo išnagrinėti ankstesniame poskyryje. Palyginus silpnai Si legiruotų ir Be legiruotų bandinių spektrų tąsas galima daryti išvadą, kad mažesniųjų energijų srityje spektras susideda iš priemaišinės spinduliuotės bei jų fononinių replikų.

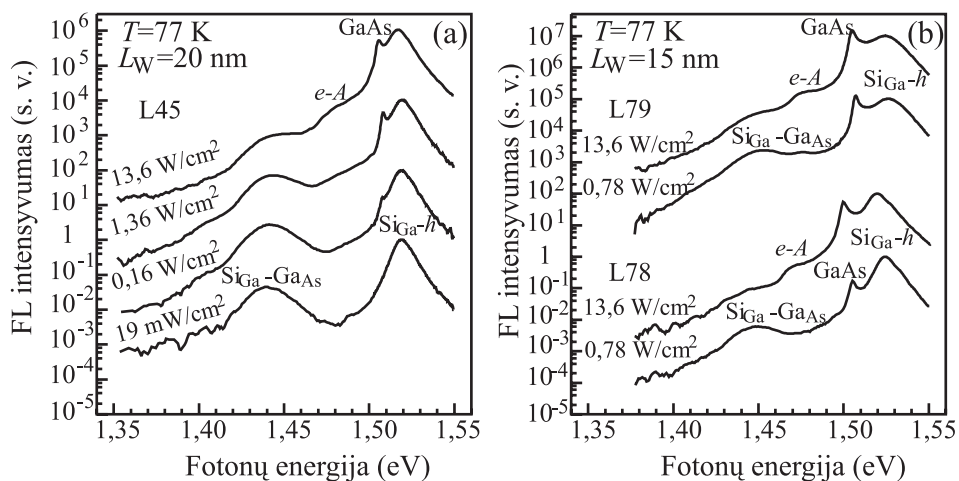
Stipriau Si legiruotų bandinių FL spektro mažesniųjų energijų srityje nebėra aiškios smulkiosios sandaros ir spinduliuotė yra daug intensyvesnė. Taip pat stebima nauja spinduliuotės juosta ties  $1,438$  eV, kai šulinio plotis



**34 pav.** FL spektrų tąsa Si  $\delta$ -legiruotuose (a)  $N_{\text{Si}} = 1,4 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (L45, L30),  $1 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  (L44) ir  $L_w = 20 \text{ nm}$  (b)  $N_{\text{Si}} = 4 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (L79),  $1,4 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (L78), nelegiruoto (L80) ir  $L_w = 15 \text{ nm}$  pločio kartotiniuose GaAs/AlAs kvantiniuose šuliniuose esant skystojo azoto temperatūrai. Palyginimui atidėti atitinkamo pločio  $p$  tipo Be  $\delta$ -legiruotų  $N_{\text{Be}} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  (S1807) ir  $2,5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (S1303) GaAs/AlAs kvantinių šulinių spektrai (brūkšninės linijos).  $\text{Si}_{\text{Ga}}\text{-Ga}_{\text{As}}$  pažymėtas elektronų šuolis iš Si donorų į pakaitinius gardelės defektus.  $e\text{-}A$  bei  $D\text{-}A$  yra laisvas elektronas- bei donoras-akceptorius spinduliuotės. Kiti žymėjimai yra kaip ir 15, 26, 30 bei 33 pav.

$L_w = 20 \text{ nm}$ , ir  $1,442 \text{ eV}$ , kai  $L_w = 15 \text{ nm}$ . Šios juostos 34 paveiksle pažymėtos  $\text{Si}_{\text{Ga}}\text{-Ga}_{\text{As}}$  simboliais. Si legiruotų  $N_{\text{Si}} = 1,4 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  ir  $L_w = 20 \text{ nm}$  pločio kvantinių šulinių spinduliuotės tąsa esant įvairiems žadinančios šviesos intensyvumams pavaizduota 35 paveikslo (a) dalyje, o  $L_w = 15 \text{ nm}$  pločio ir  $N_{\text{Si}} = 4 \cdot 10^{11}$ ,  $1,4 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  legiravimo tankių esant dviems žadinančios šviesos intensyvumams 35 (b) pav. Kaip matyti, keičiant intensyvumą linijų padėtis nekinta, o  $\text{Si}_{\text{Ga}}\text{-Ga}_{\text{As}}$  juosta išsotina kai yra didelis žadinančios šviesos intensyvumas.

Didėjant priemaišų tankiui, pradeda persikloti jų banginės funkcijos ir formuojasi priemaišinė juosta. Dar labiau padidinus priemaišų tankį, išplitusi priemaišinė juosta persikloja su laidumo juosta. Įvyksta Mott virsmas. Plačiau tai bus pristatyta sekančiame skyriuje. Nagrinėdami labiau Si legiruotus bandinius, tarėme, kad jie dar nėra išsigimę, nors ir yra arti Mott virsmo. Eksperimentiškai nustatyta, kad  $n$ -tipo kvantiniuose šuliniuose Mott virsmas įvyksta kai  $N_D = 2 \cdot 10^{11} \text{--} 4 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  [142].  $L_w = 15 \text{ nm}$  ir  $20 \text{ nm}$  pločio  $n$ -tipo



**35 pav.** FL spektrų tąsa Si  $\delta$ -legiruotuose **(a)**  $N_{\text{Si}} = 1,4 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (L45) ir  $L_{\text{W}} = 20 \text{ nm}$  **(b)**  $N_{\text{Si}} = 4 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (L79),  $1,4 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (L78) ir  $L_{\text{W}} = 15 \text{ nm}$  pločio kartotiniuose GaAs/AlAs kvantiniuose šuliniuose esant įvairiems žadinančios šviesos intensyvumams skystojo azoto temperatūroje.

kvantiniuose šuliniuose šios vertės atitinkamai lygios  $2,9 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  ir  $2,6 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  [S4]. Gali būti kad labiausiai legiruito bandinio L79 FL spektro pokyčiai yra susiję su Mott virsmu. Tačiau šiuo reiškiniu neįmanoma paaiškinti spinduliuotės juostos, kuri yra apie 100 meV žemiau draudžiamosios energijos tarpo. Įprastiniai priemaišų juostos ir juostos krašto formavimosi modeliai duoda energijos išplitimą lygų maždaug kelioms Rydberg energijoms [143]. Šio modelio irgi nepakanka paaiškinti minėti spinduliuotei.

Todėl pabandydysime paieškoti kito modelio. Silicis yra amfoterinė priemaiša GaAs kristale. Esant dideliems legiravimo tankiams, dalis Si atomų gali užimti As vietą ir tapti akceptoriais. S. Modesti su bendraautoriais [144] parodė, kad GaAs kristale Si gali tapti donoru  $\text{Si}_{\text{Ga}}$ , akceptoriumi  $\text{Si}_{\text{As}}$  ir sudaryti Si poras, klasterius bei Si atomų su savisiais defektais kompleksus, kurie kuria energijų lygmenis draudžiamosios energijos tarpe ir įtakoja savikompensacijos mechanizmus.

GaAs egzistuoja šeši savitieji taškiniai defektai: vakancija Ga mazge  $V_{\text{Ga}}$  arba As mazge  $V_{\text{As}}$ , tarpmazginis defektas, kai Ga arba As atomas atsiduria tarpmazgyje, pamaininis defektas, kai Ga užima As vietą  $\text{Ga}_{\text{As}}$  arba As užima Ga vietą  $\text{As}_{\text{Ga}}$ . Iš visų GaAs savitųjų defektų tik  $V_{\text{Ga}}$  ir  $\text{Ga}_{\text{As}}$  yra akceptoriai

[145]. Galvokime, kad nagrinėjame elektrono šuolį iš donoro  $\text{Si}_{\text{Ga}}$  į gilų akceptorinį lygmenį. Tuomet iš eksperimentinių duomenų galime rasti tokio gilaus akceptoriaus aktyvacijos energiją pagal sąryšį

$$E_A(\text{Ga}_{\text{As}}) = E(X_{e1-hh1}) + E_b(X_{hh}) - E_D(\text{Si}) - E(\text{Si}_{\text{Ga}} - \text{Ga}_{\text{As}}), \quad (4.17)$$

čia  $E(X_{e1-hh1})$  ir  $E(\text{Si}_{\text{Ga}} - \text{Ga}_{\text{As}})$  yra  $X_{e1-hh1}$  ir  $\text{Si}_{\text{Ga}} - \text{Ga}_{\text{As}}$  linijų energijos, o  $E_b(X_{hh})$  ir  $E_D(\text{Si})$  – sunkiųjų skylių eksitono ryšio ir Si donoro jonizacijos energijos (žr. 5 ir 6 lenteles).  $L_W = 15$  ir  $20$  nm pločio kvantiniuose šuliniuose rastosis pagal (4.17) lygtį gilaus akceptoriaus jonizacijos energijos vertės lygios  $E_A(\text{Ga}_{\text{As}}) = 79,6$  ir  $78,8$  meV. Tai gerai sutampa su  $78$  meV verte gauta Si legiruotame tūriniam GaAs [145, 146] ir molekulinį pluoštelių epitaksijos būdu užaugintuose Si legiruotuose GaAs sluoksniuose [147], kuriems aiškiai nustatytas pamaininis  $\text{Ga}_{\text{As}}$  defektas. Iš analogijos galime daryti išvadą, kad ir GaAs/AlAs kvantiniuose šuliniuose legiruotuose Si donorine priemaiša, esant atitinkamoms sąlygoms, formuojasi  $\text{Ga}_{\text{As}}$  defektas, kuris sukuria gilų akceptorinį lygmenį. Viename iš bandinių (L30) nestebėjome  $\text{Si}_{\text{Ga}} - \text{Ga}_{\text{As}}$  juostos (34 (a) pav.). Tai gali būti susiję su tuo, kad bandinys užaugintas žemesnėje temperatūroje, o defektų formavimasis labai jautrus auginimo sąlygoms [147].

#### 4.4 Ketvirtojo skyriaus išvados

1. Akceptorinėmis Be priemaišomis  $\delta$ -legiruotų GaAs/AlAs kvantinių šulinių FL spektruose mažesniųjų energijų srityje atrastos priemaišinės spinduliuotės fononinės replikos. Įrodyta, kad fononinės replikos susijusios su GaAs kvantinio šulinio išilginiu optiniu fononu, kurio energija sutampa su tūrinio GaAs kristalo LO fonono energija lygia  $36,75$  meV.
2. Eksperimentiškai nustatytas Huang-Rhys faktorius, kurio vertė platiems kvantiniams šuliniams artima tūrinio GaAs vertei  $S \approx 0,05$ , o siaurėjant kvantiniams šuliniams – didėja iki  $S = 0,11$ , esant  $L_W = 5$  nm. Teoriškai parodėme, kad šis sąveikos padidėjimas yra susijęs su krūvininkų

apribojimu potenciniais barjeriais ir banginės funkcijos pasikeitimu kvantiniame šulinyje.

3. Donorinėmis Si priemaišomis  $\delta$ -legiruotų GaAs/AlAs kvantinių šulinių spinduliuotės sąsajos spektre aptikta papildoma spinduliuotės juosta, kuri susijusi su  $p$ -tipo  $\text{Ga}_{\text{As}}$  pakaitinio defekto susidarymu. Rasta šio defekto aktyvacijos energija maždaug lygi 79 meV.

## 5 KVANTINIŲ ŠULINIŲ SPINDULIUOTĖ ARTI MOTT VIRSMO

Kvantiniai šuliniai su įterptomis priemaišomis įdomūs taikomosios fizikos požiūriu, kuriant infraraudonosios ar terahercų spinduliuotės jutiklius. Norint padidinti prietaisų jautrį, reikalingi dideli priemaišų tankiai, kurie pasiekiami naudojant  $\delta$  legiravimą. Pasiekus tam tikrą tankį, priemaišos pradeda sąveikauti ir pasikeičia jų savybės: gali sukurti priemaišinę juostą arba naujo tipo papildomus energijos lygmenis, kurių dalį užpildo dvimačiai laisvieji krūvininkai. Priemaišų banginių funkcijų persiklojimą nusako dielektrikas-metalas Mott virsmas. Tyrėme akceptorinių Be ir donorinių Si priemaišų įvairių legiravimo tankių arti Mott virsmo kvantinius šulinius. Gauti rezultatai paskelbti [S6], [S7], [S8] darbuose.

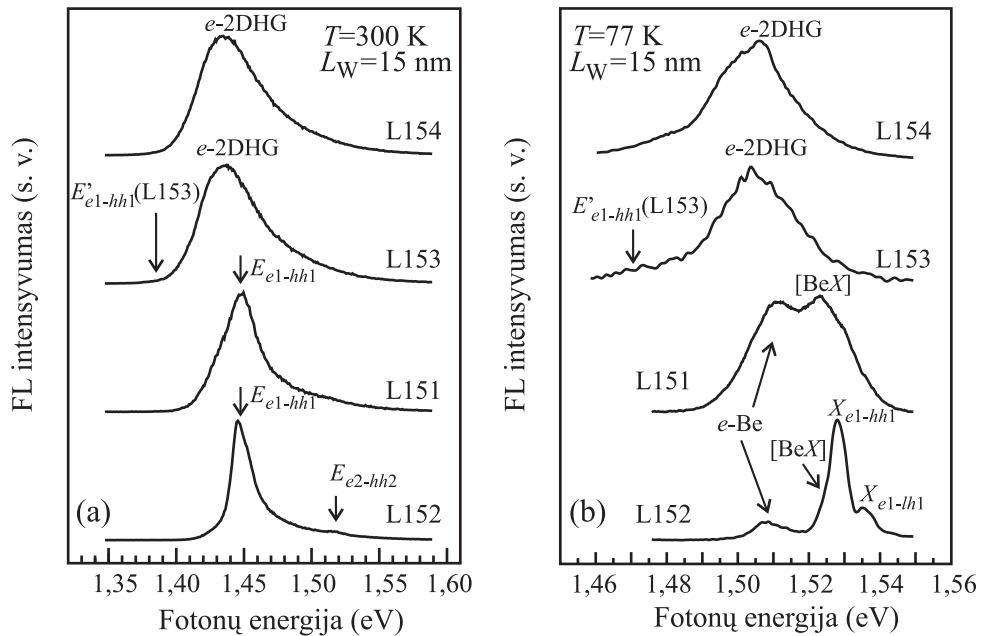
### 5.1 Eksperimentinis priemaišų tankio įtakos FL spektrams tyrimas

Pirmiausia aptarsime akceptorinėmis priemaišomis legiruotų bandinių rezultatus. Įvairiais Be akceptorinių priemaišų tankiais legiruotų  $L_w = 15$  nm pločio GaAs/AlAs kvantinių šulinių fotoluminescencijos spektrai kambario ir skystojo azoto temperatūroje pavaizduoti 36 paveiksle. Silpnai legiruoto bandinio L152 ( $N_{Be} = 2,7 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ) FL spektras skystojo azoto temperatūroje (36 (b) pav.) panašus į nelegiruoto bandinio spektrą (žr. 34 (b) pav. L80 bandinys). Aiškiai stebimos kvantinių šulinių sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitoninės spinduliuotės linijos ir priemaišinės spinduliuotės  $e$ -Be linija, būdinga Be legiruotiems kvantiniams šuliniams. Su akceptoriais surištojo eksitono spinduliuotė [BeX] nėra aiškiai išskiriama.

Stipriau legiruotų bandinių (L151, L153 ir L154) spektrai yra daug sudėtingesni. Vidutiniškai legiruoto bandinio L151 ( $N_{Be} = 2,7 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ) spektre skystojo azoto temperatūroje stebimos dvi smailės  $e$ -Be ir [BeX]. Didesniųjų energijų pusėje stebimi du vingiai, kurių energinė padėtis sutampa su  $X_{e1-hh1}$  ir  $X_{e1-lh1}$  smailių padėtimis silpnai legiruotuose kvantiniuose šuliniuose.



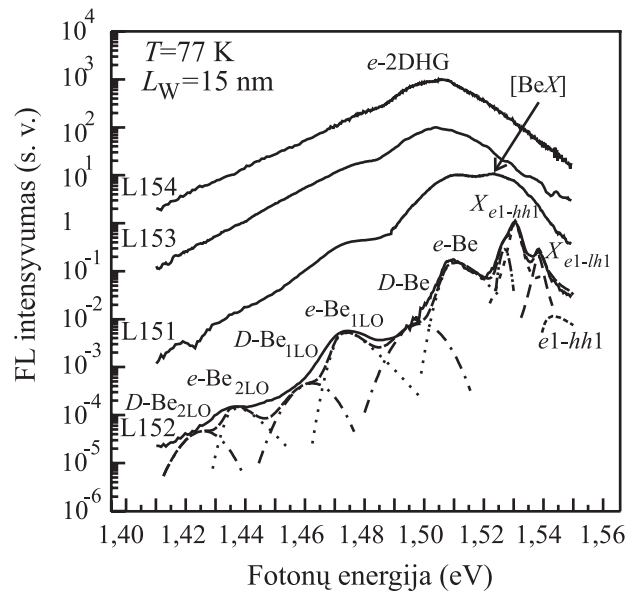
Esant kambario temperatūrai, vidutiniškai legiruoto bandinio L151 ir silpnai legiruoto bandinio L152 spektrai panašūs (36 (a) pav.). Stipriai legiruotų bandinių L153 ( $N_{\text{Be}} = 2,7 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ) ir L154 ( $N_{\text{Be}} = 5,3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ) spektrai visai kitokie negu L151 ir L152 bandinių spektrai. Pirma, skystojo azoto temperatūroje FL spektre išnyksta smulkioji sandara. Antra, esant kambario ir skystojo azoto temperatūroms, spektrų smailių maksimumai yra pasislinkę į mažesnių energijų pusę. Vėliau parodysime, kad šis reiškinys yra susijęs su dvimačių laisvųjų skylių dujų (2DHG) {two-dimensional hole gas} naujų kvantuotų būsenų atsiradimu.



**36 pav.** Be  $\delta$ -legiruotų kartotinių GaAs/AlAs kvantinių šulinių, kurių plotis  $L_W = 15 \text{ nm}$  ir priemaišų tankiai  $N_{\text{Be}} = 2,7 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (L152),  $2,7 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (L151),  $2,7 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  (L153) ir  $5,3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  (L154), FL spektrai esant (a) kambario ir (b) skystojo azoto temperatūroms. Spektrai yra normuoti ir perstumti vertikaloje skalėje.  $e$ -2DHG žymi elektronas-sunkiųjų skylių dvimatės dujos spinduliuotė. Rodykle  $E'_{e1-hh1}(\text{L153})$  pažymėtas teoriškai apskaičiuotas energijos skirtumas tarp lygmenų stipriai legiruotame L153 bandinyje. Kiti žymėjimai yra kaip ir 15 pav.

Fotoluminescencijos spektrai platesniame energijų intervale, esant skystojo azoto temperatūrai, pavaizduoti 37 paveiksle. Silpnai legiruoto bandinio L152 spektro mažesniųjų energijų pusėje stebimos dvi mažo intensyvumo smailės  $e\text{-Be}_{\text{ILO}}$  ir  $e\text{-Be}_{\text{2LO}}$  atitinkančios priemaišinės  $e\text{-Be}$

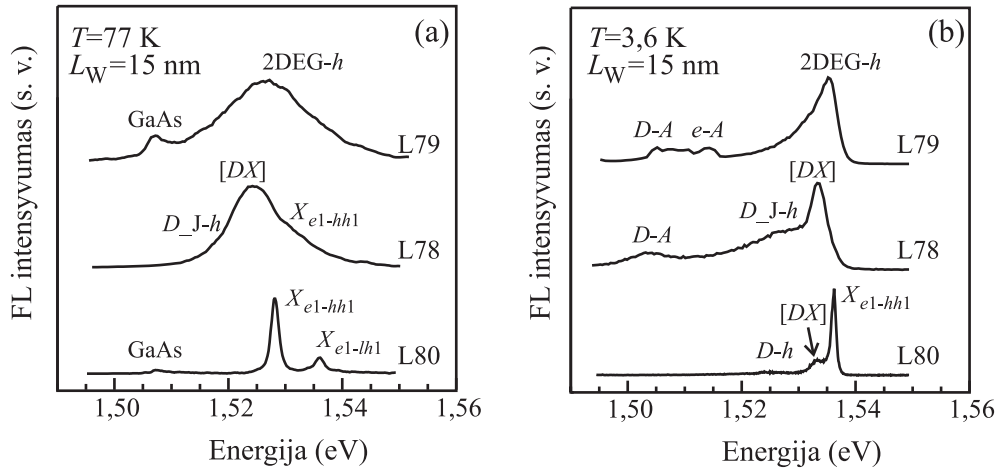
spinduliuotės fononines replikas. Stebimas ir liekamojo donoro-akceptoriaus *D*-Be spinduliuotės bei jos fononinių replikų nelabai didelis indėlis į FL spektrą. Stipriau legiruotų bandinių spektruose fononinės replikos išnyksta. Tai gali būti susiję su ekranavimu laisvaisiais krūvininkais. Jis tampa stipresnis didinant akceptorių tankį [148].



**37 pav.** FL spektrų tąša Be  $\delta$ -legiruotų kartotinių GaAs/AlAs kvantinių šulinių, kurių plotis  $L_W = 15$  nm ir  $N_{Be} = 2,7 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (L152),  $2,7 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (L151),  $2,7 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  (L153) ir  $5,3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  (L154), esant skystojo azoto temperatūrai. Išsistinės linijos yra eksperimentiniai rezultatai, o kitos linijos – teoriniai skaičiavimai. Spektrai yra perstumti vertikaliajoje skalėje.

Dabar pateiksime donorinėmis priemaišomis legiruotų bandinių tyrimo rezultatus. Kartotinių  $L_W = 15$  nm pločio GaAs/AlAs kvantinių šulinių,  $\delta$ -legiruotų Si priemaišomis  $N_{Si} = 1,4 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (L78),  $4 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (L79) ir nelegiruotų (L80), fotoluminescencijos spektrai pavaizduoti 38 (a) pav. skystojo azoto temperatūroje bei 38 (b) pav. – 3,6 K temperatūroje. Vidutiniškai legiruoto bandinio L78 spektre jau išnyksta smulkioji spektro sandara. Šiuo atveju stebima intensyviausia su donoru surištojo eksitono [DX] spinduliuotės linija. Ji susiliejęsi su sunkiųjų skylių eksitonine linija. Taip pat stebima elektronų rekombinacija per donorinius lygmenis su laisvosiomis skylėmis. Šią spinduliuotę pažymėjome  $D\_J-h$ . Manome, kad šiuo atveju donorinės priemaišos nėra pavienės, o yra suformavusios priemaišinę juostą.

Labiausiai legiruoto bandinio L79 spektre stebimą spinduliuotę priskyrėme dvimačių elektronų rekombinacijai su laisvosiomis skylėmis 2DEG- $h$ . Iš spektro 38 (b) paveiksle randame, kad skirtumas tarp juostos (lygmens) ir 2DEG energinių būsenų lygus 10,5–11 meV, tai atitiktų sužadavimo dažnį apie 2,5 THz. Panašus rezultatai gauti iš matavimų terahercų srityje [149].



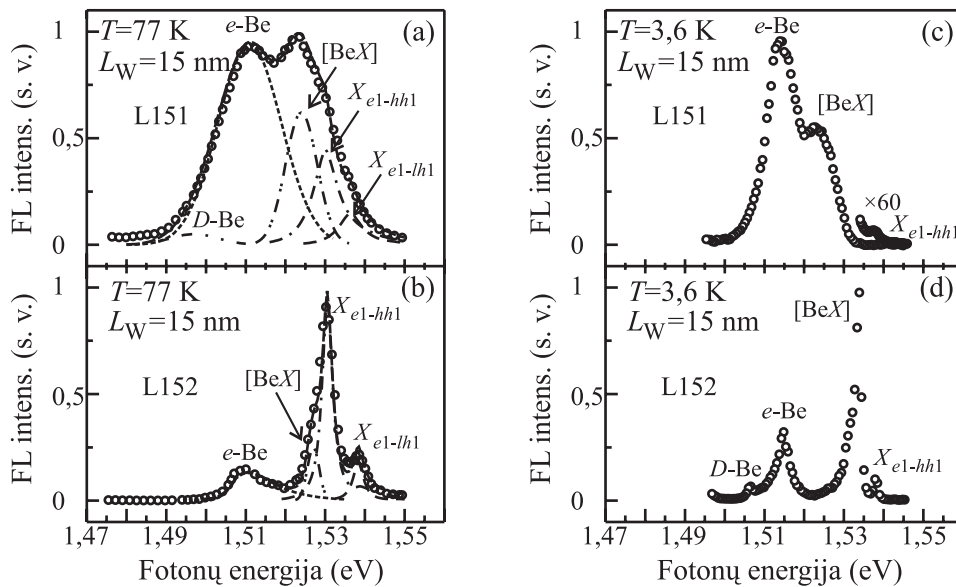
**38 pav.** Si  $\delta$ -legiruotų kartotinių GaAs/AlAs kvantinių šulinių, kurių plotis  $L_w = 15$  nm ir priemaišų tankis  $N_{Si} = 4 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (L79),  $1,4 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (L78) ir papildomai nelegiruoto (L80), FL spektrai esant (a) skystojo azoto ir (b) 3,6 K temperatūroms. Spektrai yra normuoti ir perstumti vertikalioje skalėje. 2DEG- $h$  žymi dvimačių elektronų dujų rekombinaciją su laisvosiomis skylėmis.  $D\_J-h$  žymi donorinę juosta-laisvosios skylės spinduliuotę. Kiti žymėjimai yra kaip ir 33 bei 34 pav.

## 5.2 Mott virsmas 2D sistemoje

Iki Mott virsmo formuojasi priemaišinė juosta. Galime išskirti du krizinius tankius  $N_{I\_J}$  ir  $N_M$ . Kai priemaišų tankis  $N_I < N_{I\_J}$ , priemaišų atomus galime laikyti tarpusavyje nesąveikaujančiais ir nagrinėti kaip vieną priemaišos atomą. Didinant priemaišų tankį, priemaišų banginės funkcijos pradeda persikloti ir nebegalime taikyti minėto modelio. Kuomet pasiekiamas banginių funkcijų persiklojimas, pradeda formotis priemaišinė juosta ( $I\_J$ ) ir sukuriama laidumo ( $n$ -tipo) ar valentinės ( $p$ -tipo) juostos krašto energijos būsenų tąsos [143]. Dar padidinus priemaišų tankį, išplitusi priemaišinė juosta persikloja su laidumo (valentine) juosta. Tai yra įvyksta dielektrikas-metalas

arba Mott virsmas [150, 151]. Šį virsmą nusako priemaišų tankis  $N_M$ , virš kurio laisvųjų krūvininkų tankis nepriklauso nuo temperatūros ir medžiaga tampa pusmetaliu ( $N_I > N_M$ ).

Galima manyti, kad vidutiniškai  $\delta$ -legiruoti kartotiniai GaAs/AlAs kvantiniai šuliniai (L151) yra neišsigimę, tačiau priemaišų tankis yra arti Mott virsmo. Apie silpnai ir vidutiniškai legiruotų bandinių (L152 ir L151) neišsigimimą sprendžiame iš mažo FL spektrų poslinkio kambario temperatūroje bei skystojo azoto temperatūroje stebimų  $e$ -Be ir  $D$ -Be spinduliuočių. Tačiau L151 bandinys yra arti Mott virsmo, kadangi eksitoninės spinduliuotės sritis labai išplitusi. Si ir Be legiruotų kvantinių šulinių eksperimentiniai rezultatai [152, 153] patvirtina, kad eksitoninė spinduliuotė stebima iki kvantinio šulinio medžiagos išsigimimo.



**39 pav.** FL spektrai: **(a)** stipriai legiruotų (L151), arti Mott virsmo ir **(b)** silpnai legiruotų (L152), kai priemaišos laikomos tarpusavyje nesąveikaujančiomis, kartotinių GaAs/AlAs kvantinių šulinių esant skystojo azoto temperatūrai. Atitinkamai **(c)** ir **(d)** esant 3,6 K temperatūrai. Taškai žymi eksperimentinius rezultatus, o linijos – įvairių spinduliuočių teorinę aproksimaciją.

Fotoluminescencijos spektrų iki Mott virsmo teorinės analizės rezultatai pavaizduoti 37 ir 39 paveiksluose. Linijų pavidalas apskaičiuotas remiantis anksčiau aptartu trupmeninės dimensijos erdvės modeliu. Aprašant eksitoninės

spinduliuotės  $X_{e1-hh1}$  ir  $X_{e1-lh1}$  smailes, buvo naudojama Lorentz sąsūka, o priemaišinei spinduliuotei  $e$ -Be – Gauss sąsūka. Tačiau vidutiniškai legiruoto bandinio L151  $e$ -Be spinduliuotė, kaip ir [BeX] bei  $D$ -Be spinduliuotės aproksimuotos naudojantis Gauss kreive (39 (a) pav.).

Iš 37 ir 39 pav. matyti, kad iki Mott virsmo svarbi ne tik su akceptoriumi surištojo eksitono spinduliuotė, bet ir sunkiųjų ir lengvųjų skylių laisvųjų eksitonų spinduliuotės. Tačiau dėl stiprios eksitonų sklaidos priemaišomis ir ekranavimo laisvaisiais krūvininkais šios linijos susiliejusios ir sudaro vientisą spinduliuotės juostą.

**Mott virsmas.** Trimačiu atveju Mott virsmas įvyksta, kai tenkinamas sąryšis [150]

$$N_M^{1/3} a_0 \approx 0,2, \quad (5.1)$$

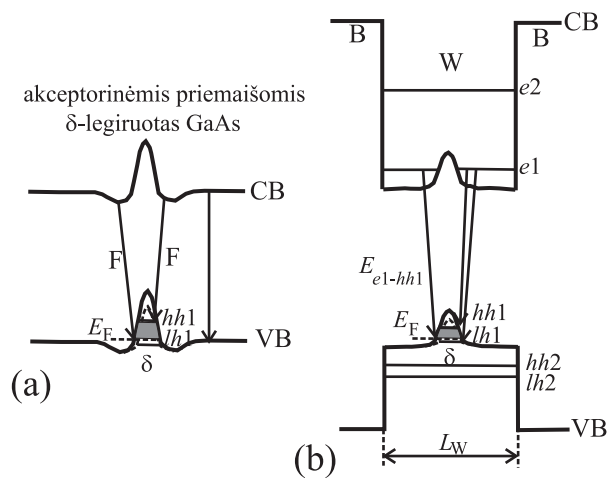
čia  $N_M$  yra krizinis legiravimo tankis [ $1/\text{cm}^3$ ] ir  $a_0$  – priemaišos Bohr spindulys [cm]. Si legiruotame tūriniame  $n$ -GaAs tai atitinka apie  $8,2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  legiravimo tankį, o Be legiruotame  $p$ -GaAs – apie  $8,6 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . Ekstrapoliuojant eksperimentinius rezultatus, rastos krizinių tankių vertės tūriniame  $n$ -GaAs atitinka apie  $2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ , o  $p$ -GaAs – apie  $2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  [111].

Žinoma, kad  $\delta$ -legiruotuose puslaidininkiuose ir kvantiniuose šuliniuose, didinant priemaišų tankį, priemaišų surištosios būsenos išplinta į priemaišinę juostą. Esant dideliems  $\delta$ -legiravimo tankiams, elektronai (skylės) yra apriboti ploname jonizuotų priemaišų sluoksnyje ir sudaro dvimates elektronų (skylių) dujas. Idealiu  $\delta$ -legiravimo atveju, priemaišos formuoja V tipo potencialą su nauju dvimačiu pojuosčiu kaip pavaizduota 40 pav. Tai sąlygoja naują kvantinio šulinio lygmenų sistemą.

Apskaičiuota, kad dielektrikas-metalas virsmas ir minėto pojuosčio formavimasis Si  $\delta$ -legiruotame GaAs įvyksta kai priemaišų tankis tenkina sąryšį [154]

$$N_I^{1/2} a_0 \approx 0,31; \quad (5.2)$$

čia  $N_I$  – krizinis legiravimo tankis [ $1/\text{cm}^2$ ], o  $a_0$  – priemaišos Bohr spindulys [cm]. Iš čia seka, kad  $\delta$ -legiruotame  $n$ -GaAs kristale Mott virsmas įvyksta kai priemaišų tankis  $N_{\text{Si}} = 9,95 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  [154]. Pritaikius sferinės simetrijos modelį akceptoriams GaAs kristale, kur jonizacijos energija  $E_{\text{Be}} = 28 \text{ meV}$  [111] ir priemaišų efektinė masė  $m_A^* = 0,31m_0$  [136], gauname Bohr spindulį  $a_0 = 2,1 \text{ nm}$ . Pagal (5.2) formulę gauname, kad  $\delta$ -legiruotame  $p$ -GaAs krizinis legiravimo tankis yra  $N_{\text{Be}} = 2,2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .



**40 pav.** Labai stipriai  $\delta$ -legiruotų akceptorinėmis priemaišomis **(a)** tūrinių kristalų ir **(b)** kvantinių šulinių energinė diagrama. Pilkai pažymėta sritis nuo sunkiųjų skylių lygmens  $hh1$  iki Fermi energijos lygmens  $E_F$  yra užpildyta laisvosiomis skylėmis.

#### Mott virsmo priklausomybė nuo kvantinio šulinio pločio.

Kvantiniuose šuliniuose priemaišų jonizacijos energija yra didesnė negu tūriniuose kristaluose. Todėl efektyvusis Bohr spindulys sumažėja ir reikia didesnių legiravimo tankių, kad persiklotų banginės funkcijos ir įvyktų Mott virsmas. Mott virsmui yra svarbus ekranavimas laisvaisiais krūvininkais. Todėl trumpai aptarsime jonizacijos energijos ir ekranavimo įtaką dvimačiu ir trimačiu atveju. G. Tränkle su bendraautoriais [155] parodė, kad dvimačiu atveju juostų poslinkio absoliutinė vertė yra didesnė negu trimačiu atveju, esant vienodiems krūvininkų tankiams. Tačiau atitinkamai Rydberg vienetais, juostų poslinkis dvimačiu atveju yra daug mažesnis negu trimačiu atveju. Ši

juostų poslinkio priklausomybė nuo dimensijos rodo, kad skiriasi ekranavimo įtaka dvimačiu ir trimačiu atvejais. Tačiau dvimačiams dariniams galima laikyti, kad ekranavimas silpnai priklauso nuo kvantinio šulinio pločio. Nežiūrint to, Mott virsmui įvykti reikalingas priemaišų tankis kvantiniame šulinyje vis tiek priklausys ne tik nuo priemaišų tipo, bet ir nuo kvantinio šulinio pločio dėl priemaišų jonizacijos energijos ir Bohr spindulio pokyčio.

**Donorinės priemaišos.** GaAs/Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As  $L_w = 5$  nm pločio kvantiniame šulinyje donorų jonizacijos energija  $E_D = 16$  meV. Tuomet Bohr spindulys  $a_D = 3,7$  nm ir krizinis tankis  $N_D = 6,98 \cdot 10^{11}$  cm<sup>-2</sup>. Tai yra daugiau negu aukščiau minėta vertė trimačiu  $\delta$  legiravimo atveju  $N_{Si} \approx 10^{11}$  cm<sup>-2</sup> ir yra artima eksperimentinėms vertėms esant GaAs/Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As kvantinio šulinio pločiui  $L_w = 5$  nm  $N_D = 2 \cdot 10^{11} - 4 \cdot 10^{11}$  cm<sup>-2</sup> [142].  $L_w = 14$  nm pločio GaAs/Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As kvantiniame šulinyje stebėtas optiškai sužadintas Mott virsmas, kai fotokrūvininkų tankis  $2 \cdot 10^{11}$  cm<sup>-2</sup> [156]. Teorinės donorų krizinių tankių vertės esant kitiems kvantinio šulinio pločiams pateiktos 7 lentelėje.

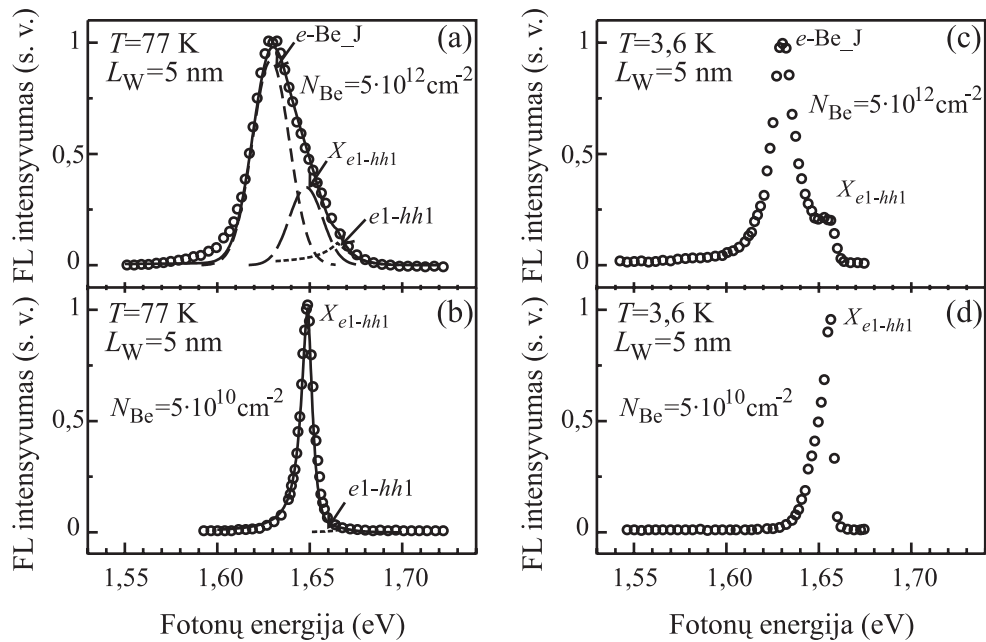
**Akceptorinės priemaišos.** Pritaikius sferinės simetrijos modelį akceptorinėms Be priemaišoms GaAs/AlAs kvantiniuose šuliniuose rastos Bohr spindulio vertės ir pagal (5.2) lygtį apskaičiuoti kriziniai tankiai įvairiems kvantinio šulinio pločiams pateikti 7 lentelėje.

**7 lentelė.** Be ir Si priemaišų Bohr spindulių  $a_0$  ir Mott virsmo tankių  $N_{Be, Si}$  vertės  $L_w$  pločio GaAs/AlAs kvantiniuose šuliniuose

$L_w, \text{ nm}$	Be akceptoriams			Si donorams		
	$E_{Be}, \text{ meV}$	$a_0, \text{ nm}$	$N_{Be}, \text{ cm}^{-2}$	$E_{Si}, \text{ meV}$	$a_0, \text{ nm}$	$N_{Si}, \text{ cm}^{-2}$
5	42	1,39	$4,97 \cdot 10^{12}$	16	3,71	$6,98 \cdot 10^{11}$
10	36	1,63	$3,62 \cdot 10^{12}$	13,2	4,5	$4,75 \cdot 10^{11}$
15	32	1,83	$2,87 \cdot 10^{12}$	11,4	5,21	$3,54 \cdot 10^{11}$
20	30	1,96	$2,50 \cdot 10^{12}$	10,2	5,82	$2,84 \cdot 10^{11}$
$\delta$ -GaAs	28	2,1	$2,2 \cdot 10^{12}$	5,84	9,85	$9,9 \cdot 10^{10}$

Palyginimui, galime pateikti, kad  $p$ -tipo selektyviai legiruotuose  $L_w = 15$  nm pločio GaAs/Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As kvantiniuose šuliniuose eksitoninė spinduliuotė išnyksta kai skylių tankis didesnis nei  $2 \cdot 10^{12}$  cm<sup>-2</sup> [157].

Iš eksperimentinių rezultatų pateiktų 36, 37 ir 39 pav. (L151 bandinys) ir 38 pav. (L78 bandinys) matyti, kad  $\delta$ -legiruotuose GaAs/AlAs kvantiniuose šuliniuose Mott virsmas įvyksta esant didesniems legiravimo tankiams negu  $\delta$ -legiruotuose tūriniuose GaAs kristaluose. Pasitvirtino ir anksčiau padaryta prielaida, kad  $L_W = 15$  nm pločio  $N_{Be} = 2,7 \cdot 10^{12}$  cm<sup>-2</sup> tankiu legiruotas bandinys L151 yra neišsigimęs, o tik susiformavusi priemaišinė juosta. Tą patį galima pasakyti ir apie  $L_W = 5$  nm pločio  $N_{Be} = 5 \cdot 10^{12}$  cm<sup>-2</sup> priemaišų tankį turintį S2071 bandinį. Šio bandinio FL spektras skystojo azoto temperatūroje pavaizduotas 41 (a) pav. Čia taškai žymi eksperimentinius rezultatus, o linijos – teorinę aproksimaciją. Savitosios spinduliuotės kreivės  $X_{e1-hh1}$  ir  $e1-hh1$  aprašytos (3.10), (3.11) ir (3.12) lygtimis, o priemaišinės spinduliuotės juosta  $e\text{-Be}_J$  – Gauss funkcija.

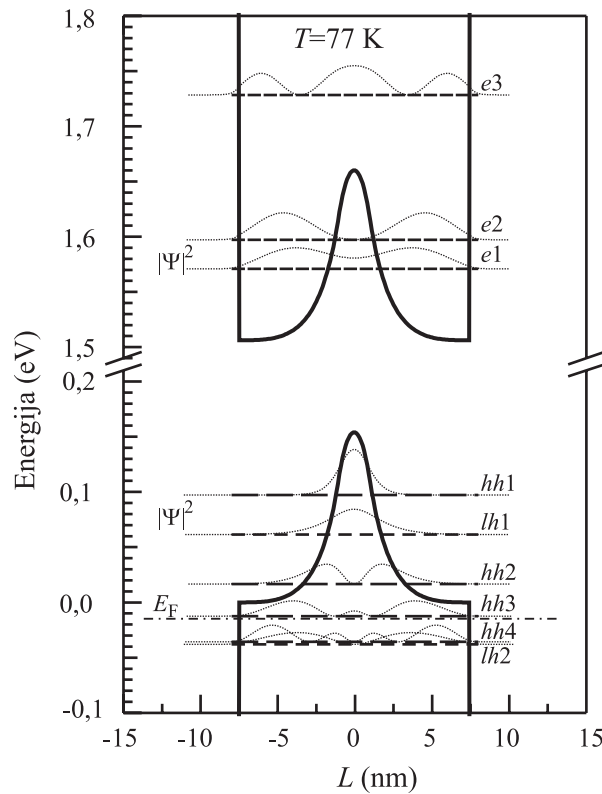


**41 pav.** Be  $\delta$ -legiruočių (a)  $N_{Be} = 5 \cdot 10^{12}$  cm<sup>-2</sup> ir (b)  $5 \cdot 10^{10}$  cm<sup>-2</sup> kartotinių GaAs/AlAs kvantinių šulinių, kurių plotis  $L_W = 5$  nm, savitosios FL spinduliuotės spektrai esant skystojo azoto temperatūrai, o (c) ir (d) – atitinkamai 3,6 K temperatūroje. Taškai žymi eksperimentinius rezultatus, o linijos – įvairių spinduliuočių teorinę aproksimaciją.  $e\text{-Be}_J$  žymi priemaišinės spinduliuotės juostą. Kiti žymėjimai yra kaip ir 19 pav.

**Dvimačių dujų formavimas.** Stipriai legiruotų bandinių L153 ( $N_{Be} = 2,7 \cdot 10^{13}$  cm<sup>-2</sup>) ir L154 ( $N_{Be} = 5,3 \cdot 10^{13}$  cm<sup>-2</sup>) atveju (žr. 36 ir 37 pav.) galime



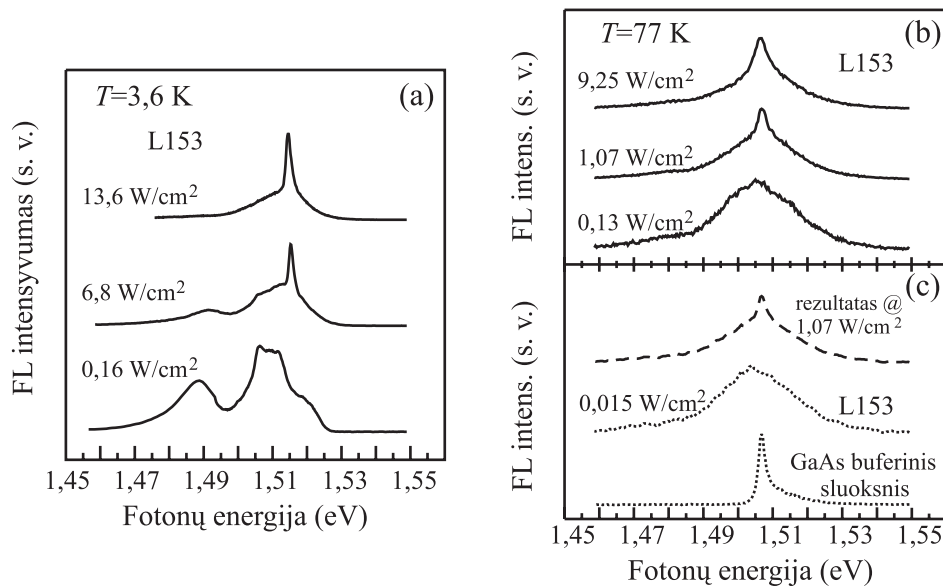
priimti, kad V tipo potencialas yra susiformavęs ir kvantinio šulinio lygmenų sistema yra pakitusi. Šioms prielaidoms pagrįsti apskaičiavome L153 bandinio, kuriame Be priemaišų tankis  $N_{Be} = 2,7 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ , valentinės ir laidumo juostų sandarą skystojo azoto temperatūroje. Tuo tikslu sprendėme suderintines Poisson ir Schrödinger lygtis [158, 159]. Skaičiavimams taikėme tokį modelį: priemaišos tolygiai pasiskirsčiusios 2 nm plotyje kvantinio šulinio centre. Neįskaitėme pamaininės sąveikos reiškinių, kurie nėra tokie svarbūs energijos spektrui [160] ir supaprastinome sudėtingą valentinę juostą [161] tardami, kad sunkiųjų ir lengvųjų skylių juostos yra nepriklausomos. Skaičiavimo rezultatai apibendrinti 42 paveiksle.



**42 pav.** Akceptoriais  $N_A = 2,7 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$   $\delta$ -legiruoto 15 nm pločio kvantinio šulinio skystojo azoto temperatūroje energinė diagrama, apskaičiuota sprendžiant suderintines Poisson ir Schrödinger lygtis.

Bandinio L153 apskaičiuotas energijų skirtumas  $E'_{e1-hh1}(L153)$  tarp elektronų lygmens  $e1$  ir sunkiųjų skylių lygmens  $hh1$  atidėtas 36 pav. ir gerai sutampa su FL juostos pradžia tiek kambario tiek skystojo azoto temperatūrose.

Akceptoriais stipriai  $\delta$ -legiruotų puslaidininkinių darinių spektruose buvo stebėti tam tikri ypatumai [162, 163, 164, 165, 166]. Iš jų galime paminėti netiesioginę rekombinaciją bei Fermi lygmens singularumą. Paminėti reiškiniai priklauso nuo žadinančio šviesos intensyvumo ir temperatūros. Mes irgi atlikome tokius eksperimentus. Bandinio L153 spektrų priklausomybė nuo žadinančios šviesos intensyvumo pavaizduota 43 (a, b) pav. Panaši spektrų priklausomybė buvo stebėta ir kito stipriai legiruoto bandinio L154 spektruose.



**43 pav.** Be  $\delta$ -legiruotų  $N_{\text{Be}} = 2,7 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  kartotinių GaAs/AlAs kvantinių šulinių, kurių plotis  $L_w = 15 \text{ nm}$  (L153), savitosios FL spinduliuotės spektrai (a) 3,6 K ir (b) skystojo azoto temperatūrose esant įvairiems žadinančios šviesos intensyvumams (c) GaAs buferinio sluoksnio (gauto iš L153 bandinio nuėsdinus kvantinius šulinius) ir L153 bandinio spektrai bei jų suminis rezultatas.

Tačiau mes neaptikome netiesioginių optinių šuolių [162, 163], susijusių su erdvėje atskirtų elektronų ir skylių rekombinacija. Tai galima paaiškinti krūvininkų pasiskirstymu kvantiniame šulinyje. Šį pasiskirstymą vaizduoja banginių funkcijų modulio kvadratai pateikti 42 pav. Atribotuose dariniuose, kitaip negu tūriniuose kristaluose, elektronai turi didelę tikimybę įsiskverbti į klasikiniu atveju draudžiamą sritį kvantinio šulinio centre ir ten rekombinuoti su skylėmis esančiomis V tipo potencinėje duobėje. Todėl yra pakankamai

didelė vertikaliųjų šuolių tikimybė. Stipriai legiruotuose bandiniuose ties Fermi lygmens energija stebimas FL intensyvumo padidėjimas, kuris priklauso nuo žadinančios šviesos intensyvumo. Šis reiškinys dar vadinamas Fermi lygmens singularumu [164, 165, 166]. Galima manyti, kad ir mūsų atveju stebime šį reiškinį 43 (a, b) pav. Tačiau mes išsiaiškinome, kad mūsų bandinių spektruose stebėtas spektro ypatumas yra susijęs su GaAs buferinio sluoksnio spinduliuote. 43 (c) paveiksle pavaizduotas L153 bandinio spektras, esant mažiausiam žadinančios šviesos intensyvumui. Taip pat jame atidėtas GaAs buferinio sluoksnio, gauto iš L153 bandinio nuėsdinus kvantinius šulinius, spektras. Viršutinė kreivė vaizduoja tų dviejų spektrų suminį rezultatą.

Spektrus, kurie pateikti 43 (a) pav. galime išskaidyti į dvi dedamąsias: kvantinių šulinių ir buferinio sluoksnio FL spektrus. Šių spektrų suma turi požymius būdingus Fermi lygmens singularumui: priklauso nuo temperatūros ir žadinančios šviesos intensyvumo [164]. Iš čia seka praktinė išvada, kad tiriant sudėtingų darinių FL spektrus, reikia įvertinti įvairių sluoksnių galimas spinduliuotes ir eksperimentiškai jas patikrinti.

### **5.3 Penktojo skyriaus išvados**

1. Iki Mott virsmo stebima savitoji eksitoninė, surištojo eksitono ir priemaišinė spinduliuotė. Arti Mott virsmo formuojasi priemaišinė juosta: FL spektrai išplinta ir spinduliuotės juostos persikloja.
2. Nustatėme, kad priemaišų tankis, kuriam esant įvyksta Mott virsmas, priklauso nuo kvantinio šulinio pločio. Siaurėjant kvantiniam šuliniiui reikia didesnių priemaišų tankių, nes sumažėja priemaišos Bohr spindulys ir tik esant didesniems tankiams persikloja banginės funkcijos.
3. Stipriai  $\delta$ -legiruotuose bandiniuose, kai įvyksta dielektrikas-metalas Mott virsmas, formuojasi dvimatės skylių (elektronų) dujos ir susiformuoja naujo tipo kvantinio šulinio lygmenų sistema.

## IŠVADOS

1. Į kvantinius šulinius įterpus priemaišų be joms būdingos priemaišinės spinduliuotės, FL spektruose stebima su priemaiša surištojo eksitono linija. Dėl įterptų priemaišų padidėja sunkiųjų ir lengvųjų skylių eksitoninių linijų plotis.
2. Nustatėme, kad GaAs/AlAs kvantinių šulinių priemaišinės spinduliuotės linijos forma yra asimetrinė. Asimetriškumas labiausiai pasireiškia akceptorinėms nei donorinėms priemaišoms. Tai susiję su platesniu akceptorių sugerties spektru.
3. Be  $\delta$ -legiruotų GaAs/AlAs kvantinių šulinių FL spektro mažesnių energijų srityje atradome dvi papildomas smailes. Įrodėme, kad tai yra priemaišinės spinduliuotės  $e$ -Be pirmoji ir antroji fononinės replikos. Nustatėme, kad atstumas tarp linijų lygus GaAs išilginio optinio fonono energijai  $\hbar\omega_{LO} = 36,75$  meV.
4. Eksperimentiškai ir teoriškai nustatėme  $e$ -Be spinduliuotės sąveikos su LO fononu stiprį kurį išreiškia Huang-Rhys faktorius. Gavome, kad siaurėjant kvantiniame šuliniui Huang-Rhys faktorius didėja. Parodėme, kad padidėjimas yra susijęs su krūvininkų apribojimu kvantiniame šulinyje ir banginės funkcijos pasikeitimu.
5. Pademonstravome, kad dvimačiuose dariniuose Mott virsmas įvyksta prie didesnių priemaišų tankių nei trimačiu atveju. Eksperimentiškai parodėme, kad Be  $\delta$ -legiruotuose  $L_W = 15$  nm pločio kvantiniuose šuliniuose Mott virsmas įvyksta kai  $N_{Be} \geq 3 \cdot 10^{12}$  cm<sup>-2</sup>, o  $L_W = 5$  nm pločio – kai  $N_{Be} \geq 5 \cdot 10^{12}$  cm<sup>-2</sup>. Tuo tarpu  $\delta$ -GaAs tai įvyksta kai  $N_{Be} = 2,2 \cdot 10^{12}$  cm<sup>-2</sup>.
6. Keičiant GaAs/AlAs kvantinių šulinių plotį, Be priemaišinių lygmenų energiją galima keisti nuo 28 meV iki 45 meV. Tuo tarpu,  $n$ -tipo Si priemaišinių lygmenų energiją galima keisti 6–16 meV intervale. Akceptorinės Be priemaišos taikytinos 6,8–10,9 THz, o

donorinės Si priemaišos 1,4–3,8 THz srities GaAs/AlAs jutikliams ir emiteriams kurti.

7. Stipriai  $n$ -tipo Si  $\delta$ -legiruoti kvantiniai šuliniai, pavyzdžiui,  $L_w = 15$  nm ir  $N_{Si} = 4 \cdot 10^{11}$  cm<sup>-2</sup>, gali būti pritaikyti kuriant dvimatės elektronų dujos-laisvi elektronai šuolių detektorius, veikiantį 2,5 THz srityje.

## LITERATŪROS SĄRAŠAS

1. L. Esaki and R. Tsu, Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors, *IBM Journal of Research and Development* **14** (1), 61-65 (1970).
2. H. L. Störmer, J. P. Eisenstein, A. C. Gossard, W. Wiegmann, and K. Baldwin, Quantization of the Hall effect in an anisotropic three-dimensional electronic system, *Physical Review Letters* **56** (1), 85-88 (1986).
3. D. Heiman, B. B. Goldberg, A. Pinczuk, C. W. Tu, A. C. Gossard, and J. H. English, Optical Anomalies of the Two-Dimensional Electron Gas in the Extreme Magnetic Quantum Limit, *Physical Review Letters* **61** (5), 605-608 (1988).
4. A. Y. Cho, GaAs Epitaxy by a Molecular Beam Method: Observations of Surface Structure on the (001) Face, *Journal of Applied Physics* **42** (5), 2074-2081 (1971).
5. A. Y. Cho, Growth of Periodic Structures by the Molecular-Beam Method, *Applied Physics Letters* **19** (11), 467-468 (1971).
6. L. L. Chang, L. Esaki, and R. Tsu, Resonant tunneling in semiconductor double barriers, *Applied Physics Letters* **24** (12), 593-595 (1974).
7. L. Esaki and L. L. Chang, New Transport Phenomenon in a Semiconductor "Superlattice", *Physical Review Letters* **33** (8), 495-498 (1974).
8. R. Dingle, W. Wiegmann, and C. H. Henry, Quantum States of Confined Carriers in Very Thin  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -GaAs- $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  Heterostructures, *Physical Review Letters* **33** (14), 827-830 (1974).
9. H. M. Manasevit, Single-crystal gallium arsenide on insulating substrates, *Applied Physics Letters* **12** (4), 156-159 (1968).
10. W. T. Tsang, Chemical beam epitaxy of InP and GaAs, *Applied Physics Letters* **45** (11), 1234-1236 (1984).
11. A. Lopez-Otero, Hot wall epitaxy, *Thin Solid Films* **49** (1), 3-57 (1978).
12. C. H. L. Goodman, M. V. Pessa, Atomic layer epitaxy, *Journal of Applied Physics* **60** (3), R65-R81 (1986).
13. H. Harima, Properties of GaN and related compounds studied by means of Raman scattering, *Journal of Physics: Condensed Matter* **14** (38), R967-R993 (2002).
14. Z. I. Alferov, Nobel Lecture: The double heterostructure concept and its applications in physics, electronics, and technology, *Reviews of Modern Physics* **73** (3), 767-782 (2001).
15. I. Hernández-Calderón, iš: *Optoelectronic Properties of Semiconductors and Superlattices: II-VI Semiconductor Materials and their Applications*, Vol. 12, ed. M. C. Tamargo (Taylor and Francis, New York, 2002) pp. 113-170.
16. Sadao Adachi, GaAs, AlAs, and  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  Material parameters for use in research and device applications, *Journal of Applied Physics* **58** (3), R1-R29 (1985).
17. W. A. Harrison, E. A. Kraut, J. R. Waldrop, and R. W. Grant, Polar heterojunction interfaces, *Physical Review B* **18** (8), 4402-4410 (1978).
18. J. S. Blakemore, Semiconducting and other major properties of gallium arsenide, *Journal of Applied Physics* **53** (10), R123-R181 (1982).
19. I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan, Band parameters for III-V

- compound semiconductors and their alloys, *Journal of Applied Physics* **89** (11), 5815-5875 (2001).
20. V. Fiorentini, Semiconductor band structures at zero pressure, *Physical Review B* **46** (4), 2086-2091 (1992).
  21. K. Hess, D. Bimberg, N. O. Lipari, J. U. Fischbach, and M. Altarelli, Band parameter determination of III-V compounds from high-field magnetorelectance of excitons, iš: *Proc. 13th Int. Conf. on Physics of Semiconductors*, ed. F. G. Fumi, 1976, Rome, pp. 142-145.
  22. P. Lawaetz, Valence-Band Parameters in Cubic Semiconductors, *Physical Review B* **4** (10), 3460-3467 (1971).
  23. A. Baldereschi and Nunzio O. Lipari, Spherical Model of Shallow Acceptor States in Semiconductors, *Physical Review B* **8** (6), 2697-2709 (1973).
  24. H. J. Lee, L. Y. Juravel, J. C. Woolley, and A. J. Spring Thorpe, Electron transport and band structure of Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As alloys, *Physical Review B* **21** (2), 659-669 (1980).
  25. L. Esaki, A Bird's-Eye View on the Evolution of Semiconductor Superlattices and Quantum Wells, *IEEE Journal of Quantum Electronics* **QE-22** (9), 1611-1624 (1986).
  26. B. Gil, D. J. Dunstan, J. Calatayud, H. Mathieu, and J. P. Faurie, Electronic structure of cadmium-telluride-zinc-telluride strained-layer superlattices under pressure, *Physical Review B* **40** (8), 5522-5528 (1989).
  27. M. Holtz, R. Cingolani, K. Reimann, R. Muralidharan, K. Syassen, and K. Ploog, Electronic structure of GaAs/AlAs symmetric superlattices: A high-pressure study near the type -I-type -II crossover, *Physical Review B* **41** (6), 3641-3646 (1990).
  28. J. Manassès, Y. Guldner, J. P. Vieren, M. Voos, and J. P. Faurie, Temperature-dependent band structure of Hg<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te-CdTe superlattices, *Physical Review B* **44** (24), 13541-13548 (1991).
  29. F. J. Ribeiro, R. B. Capaz, and B. Koiller, Electric-Field Effects on the Band-Edge States of GaAs/AlAs Coupled Quantum Wells, *physica status solidi (b)* **232** (1), 148-151 (2002).
  30. V. Karpus, *Dvimačiai elektronai* (UAB Ciklonas, Vilnius, 2004).
  31. C. Weisbuch, iš: *Semiconductors and Semimetals: Applications of Multiquantum Wells, Selective Doping, and Superlattices*, Vol. 24, ed. Raymond Dingle (Academic Press, San Diego, 1987) pp. 1-133.
  32. L. C. Andreani and A. Pasquarello, Accurate theory of excitons in GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum wells, *Physical Review B* **42** (14), 8928-8938 (1990).
  33. R. Dingle, A. C. Gossard, and W. Wiegmann, Direct Observation of Superlattice Formation in a Semiconductor Heterostructure, *Physical Review Letters* **34** (21), 1327-1330 (1975).
  34. A. T. da Cunha Lima, I. C. da Cunha Lima, and A. Ferreira da Silva, Effect of the type-I to type-II transition on the binding energy of shallow donors in GaAs/AlAs quantum wells, *Physical Review B* **55** (23), 15420-15422 (1997).
  35. K. J. Moore, P. Dawson, and C. T. Foxon, Effects of electronic coupling on the band alignment of thin GaAs/AlAs quantum-well structures, *Physical Review B* **38** (5), 3368-3374 (1988).
  36. R. L. Anderson, Germanium-Gallium Arsenide Heterojunctions, *IBM Journal of Research and Development* **4** (3), 283-287 (1960).
  37. W. R. Frensley and H. Kroemer, Prediction of semiconductor heterojunction

- discontinuities from bulk band structures, *Journal of Vacuum Science and Technology* **13** (4), 810-815 (1976).
38. C. G. Van de Walle and R. M. Martin, Theoretical calculations of heterojunction discontinuities in the Si/Ge system, *Physical Review B* **34** (8), 5621-5634 (1986).
  39. C. G. Van de Walle, Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory, *Physical Review B* **39** (3), 1871-1883 (1989).
  40. Walter A. Harrison, Theory of band line-ups, *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* **3** (4), 1231-1238 (1985).
  41. M. D. Williams and T. Y. Chang, Determination of the valence band offset at the asymmetric GaAs/In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As interface by ultraviolet photoemission spectroscopy, *Journal of Vacuum Science and Technology B* **11** (4), 1656-1659 (1993).
  42. H. Kroemer, Wu-Yi Chien, J. S. Harris, Jr., and D. D. Edwall, Measurement of isotype heterojunction barriers by *C-V* profiling, *Applied Physics Letters* **36** (4), 295-297 (1980).
  43. H. Kroemer, Determination of heterojunction band offsets by capacitance-voltage profiling through nonabrupt isotype heterojunctions, *Applied Physics Letters* **46** (5), 504-505 (1985).
  44. R. Dingle, W. Wiegmann, and C. H. Henry, Quantum States of Confined Carriers in Very Thin Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As-GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As Heterostructures, *Physical Review Letters* **33** (14), 827-830 (1974).
  45. R. C. Miller, D. A. Kleinman, and A. C. Gossard, Energy-gap discontinuities and effective masses for GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells, *Physical Review B* **29** (12), 7085-7087 (1984).
  46. D. Arnold, A. Ketterson, T. Henderson, J. Klem, and H. Morkoç, Determination of the valence-band discontinuity between GaAs and (Al,Ga)As by the use of *p*<sup>+</sup>-GaAs-(Al,Ga)As-*p*<sup>-</sup>-GaAs capacitors, *Applied Physics Letters* **45** (11), 1237-1239 (1984).
  47. R. C. Miller, D. A. Kleinman, W. A. Nordland, Jr., and A. C. Gossard, Luminescence studies of optically pumped quantum wells in GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As multilayer structures, *Physical Review B* **22** (2), 863-871 (1980).
  48. R. C. Miller, D. A. Kleinman, W. T. Tsang, and A. C. Gossard, Observation of the excited level of excitons in GaAs quantum wells, *Physical Review B* **24** (2), 1134-1136 (1981).
  49. P. Dawson, K. J. Moore, G. Duggan, H. I. Ralph, and C. T. B. Foxon, Unambiguous observation of the 2*s* state of the light- and heavy-hole excitons in GaAs-(AlGa)As multiple-quantum-well structures, *Physical Review B* **34** (8), 6007-6010 (1986).
  50. D. C. Reynolds, K. K. Bajaj, C. Leak, G. Peters, W. Theis, P. W. Yu, K. Alavi, C. Colvard, and I. Shidlovsky, Well-resolved higher excited states of the light- and heavy-hole free excitons in a 225-Å Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As-GaAs multi-quantum-well structure, *Physical Review B* **37** (6), 3117-3119 (1988).
  51. R. C. Miller, A. C. Gossard, D. A. Kleinman, and O. Munteanu, Parabolic quantum wells with the GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As system, *Physical Review B* **29** (6), 3740-3743 (1984).
  52. R. C. Miller, A. C. Gossard, and D. A. Kleinman, Band offsets from two special GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum-well structures, *Physical Review B* **32** (8), 5443-



- 5446 (1985).
53. R. C. Miller, A. C. Gossard, G. D. Sanders, Yia-Chung Chang, and J. N. Schulman, New evidence of extensive valence-band mixing in GaAs quantum wells through excitation photoluminescence studies, *Physical Review B* **32** (12), 8452-8454 (1985).
  54. Hanyou Chu and Yia-Chung Chang, Theory of line shapes of exciton resonances in semiconductor superlattices, *Physical Review B* **39** (15), 10861-10871 (1989).
  55. Q. X. Zhao, P. O. Holtz, C. I. Harris, B. Monemar, and E. Veje, Free and acceptor-bound excitons in the transition region between two-dimensional and quasi-three-dimensional GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As systems, *Physical Review B* **50** (3), 2023-2026 (1994).
  56. J.-Y. Marzin, M. N. Charasse, and B. Sermage, Optical investigation of a new type of valence-band configuration in In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As-GaAs strained superlattices, *Physical Review B* **31** (12), 8298-8301 (1985).
  57. L. C. West and S. J. Eglash, First observation of an extremely large-dipole infrared transition within the conduction band of a GaAs quantum well, *Applied Physics Letters* **46** (12), 1156-1158 (1985).
  58. B. F. Levine, R. J. Malik, J. Walker, K. K. Choi, C. G. Bethea, D. A. Kleinman, and J. M. Vandenberg, Strong 8.2 μm infrared intersubband absorption in doped GaAs/AlAs quantum well waveguides, *Applied Physics Letters* **50** (5), 273-275 (1987).
  59. F. Szmulowicz, T. Oogarah, J. Ehret, K. Mahalingam, H. C. Liu, S. M. Hegde, J. Solomon, D. Tomich, G. Landis, and G. J. Brown, Off-resonant absorption in bound-to-continuum *p*-type GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells: Overcoming absorption saturation with doping, *Physical Review B* **68** (8), 085305(12) (2003).
  60. H. C. Liu, C. Y. Song, A. J. SpringThorpe, and J. C. Cao, Terahertz quantum-well photodetector, *Applied Physics Letters* **84** (20), 4068-4070 (2004).
  61. David Z.-Y. Ting, Yia-Chung Chang, Sumith V. Bandara, and Sarath D. Gunapala, Quantum well intrasubband photodetector for far infrared and terahertz radiation detection, *Applied Physics Letters* **91** (7), 073510(3) (2007).
  62. Jerome Faist, Federico Capasso, Deborah L. Sivco, Carlo Sirtori, Albert L. Hutchinson, and Alfred Y. Cho, Quantum Cascade Laser, *Science* **264** (5158), 553-556 (1994).
  63. E. Mujagić, M. Austerer, S. Schartner, M. Nobile, L. K. Hoffmann, W. Schrenk, G. Strasser, M. P. Semtsiv, I. Bayrakli, M. Wienold, and W. T. Masselink, Impact of doping on the performance of short-wavelength InP-based quantum-cascade lasers, *Journal of Applied Physics* **103** (3), 033104(4) (2008).
  64. G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang, and L. Esaki, Exciton binding energy in quantum wells, *Physical Review B* **26** (4), 1974-1979 (1982).
  65. Ronald L. Greene, Krishan K. Bajaj, and Dwight E. Phelps, Energy levels of Wannier excitons in GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum-well structures, *Physical Review B* **29** (4), 1807-1812 (1984).
  66. G. D. Sanders and Yia-Chung Chang, Effect of band hybridization on exciton states in GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells, *Physical Review B* **32** (8), 5517-5520 (1985).
  67. X. F. He, Anisotropy and isotropy: A model of fraction-dimensional space, *Solid State Communications* **75** (2), 111-114 (1990).

68. X. F. He, Fractional dimensionality and fractional derivative spectra of interband optical transitions, *Physical Review B* **42** (18), 11751-11756 (1990).
69. X. F. He, Excitons in anisotropic solids: The model of fractional-dimensional space, *Physical Review B* **43** (3), 2063-2069 (1991).
70. P. Lefebvre, P. Christol, and H. Mathieu, Unified formulation of excitonic absorption spectra of semiconductor quantum wells, superlattices, and quantum wires, *Physical Review B* **48** (23), 17308-17315 (1993).
71. A. Matos-Abiague, L. E. Oliveira, and M. de Dios-Leyva, Fractional-dimensional approach for excitons in GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum wells, *Physical Review B* **58** (7), 4072-4076 (1998).
72. P. Christol, P. Lefebvre, and H. Mathieu, Fractional-dimensional calculation of exciton binding energies in semiconductor quantum wells and quantum-well wires, *Journal of Applied Physics* **74** (9), 5626-5637 (1993).
73. H. Mathieu, P. Lefebvre, and P. Christol, Simple analytical method for calculating exciton binding energies in semiconductor quantum wells, *Physical Review B* **46** (7), 4092-4101 (1992).
74. D. C. Rogers, J. Singleton, R. J. Nicholas, C. T. Foxon, and K. Woodbridge, Magneto-optics in GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum wells, *Physical Review B* **34** (6), 4002-4009 (1986).
75. S. Rudin and T. L. Reinecke, Temperature-dependent exciton linewidths in semiconductors quantum wells, *Physical Review B* **41** (5), 3017-3027 (1990).
76. S. Rudin, T. L. Reinecke, and B. Segall, Temperature-dependent exciton linewidths in semiconductors, *Physical Review B* **42** (17), 11218-11231 (1990).
77. V. Srinivas, J. Hryniewicz, Y. J. Chen, and C. E. C. Wood, Intrinsic linewidths and radiative lifetimes of free excitons in GaAs quantum wells, *Physical Review B* **46** (16), 10193-10196 (1992).
78. D. Gammon, S. Rudin, T. L. Reinecke, D. S. Katzer, and C. S. Kyono, Phonon broadening of excitons in GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells, *Physical Review B* **51** (23), 16785-16789 (1995).
79. S. Rudin and T. L. Reinecke, Effects of exciton–acoustic-phonon scattering on optical line shapes and exciton dephasing in semiconductors and semiconductor quantum wells, *Physical Review B* **66** (8), 085314(14) (2002).
80. H. Zhao, S. Wachter, and H. Kalt, Effect of quantum confinement on exciton-phonon interactions, *Physical Review B* **66** (8), 085337(5) (2002).
81. Johnson Lee, Emil S. Koteles, and M. O. Vassell, Luminescence linewidths of excitons in GaAs quantum wells below 150 K, *Physical Review B* **33** (8), 5512-5516 (1986).
82. A. Venu Gopal, Rajesh Kumar, A. S. Vengurlekar, A. Bosacchi, S. Franchi, and L. N. Pfeiffer, Photoluminescence study of exciton–optical phonon scattering in bulk GaAs and GaAs quantum wells, *Journal of Applied Physics* **87** (4), 1858-1862 (2000).
83. G. Bastard, Hydrogenic impurity states in a quantum well: A simple model, *Physical Review B* **24** (8), 4714-4722 (1981).
84. C. Mailhot, Yia-Chung Chang, and T. C. McGill, Energy spectra of donors in GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum well structures in the effective-mass approximation, *Physical Review B* **26** (8), 4449-4457 (1982).
85. R. L. Greene and K. K. Bajaj, Energy levels of hydrogenic impurity states in GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum well structures, *Solid State Communications* **45** (9), 825-829 (1983).

86. C. Priester, G. Allan, and M. Lannoo, Resonant impurity states in quantum-well structures, *Physical Review B* **29** (6), 3408-3411 (1984).
87. Ronald L. Greene and K. K. Bajaj, Effect of magnetic field on the energy levels of a hydrogenic impurity center in GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum-well structures, *Physical Review B* **31** (2), 913-918 (1985).
88. Ronald L. Greene and K. K. Bajaj, Binding energy of the 2p<sub>0</sub>-like level of a hydrogenic donor in GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum-well structures, *Physical Review B* **31** (6), 4006-4008 (1985).
89. W. T. Masselink, Yia-Chung Chang, and H. Morkoç, Binding energies of acceptors in GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells, *Physical Review B* **28** (12), 7373-7376 (1983).
90. W. T. Masselink, Yia-Chung Chang, and H. Morkoç, Acceptor spectra of Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As-GaAs quantum wells in external fields: Electric, magnetic, and uniaxial stress, *Physical Review B* **32** (8), 5190-5201 (1985).
91. L. E. Oliveira and L. M. Falicov, Energy spectra of donors and acceptors in quantum-well structures: Effect of spatially dependent screening, *Physical Review B* **34** (12), 8676-8683 (1986).
92. Jules D. Levine, Nodal Hydrogenic Wave Functions of Donors on Semiconductor Surfaces, *Physical Review* **140** (2A), A586-A589 (1965).
93. X. L. Yang, S. H. Guo, F. T. Chan, K. W. Wong, and W. Y. Ching, Analytic solution of a two-dimensional hydrogen atom. I. Nonrelativistic theory, *Physical Review A* **43** (3), 1186-1196 (1991).
94. W. M. Zheng, M. P. Halsall, P. Harmer, P. Harrison, and M. J. Steer, Acceptor binding energy in  $\delta$ -doped GaAs/AlAs multiple-quantum wells, *Journal of Applied Physics* **92** (10), 6039-6042 (2002).
95. X. Liu, A. Petrou, B. D. McCombe, J. Ralston, and G. Wicks, Photoluminescence study of confined donors in GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells, *Physical Review B* **38** (12), 8522-8525 (1988).
96. P. Tronc, Yu. E. Kitaev, A. G. Panfilov, M. F. Limonov, G. Wang, and V. P. Smirnov, Bound-state symmetries and optical transitions in GaAs/AlAs quantum wells and superlattices with impurities and defects, *Physical Review B* **61** (3), 1999-2007 (2000).
97. Alfredo Pasquarello, Lucio Claudio Andreani, and Ryszard Buczko, Binding energies of excited shallow acceptor states in GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum wells, *Physical Review B* **40** (8), 5602-5612 (1989).
98. M. Helm, F. M. Peeters, F. DeRosa, E. Colas, J. P. Harbison, and L. T. Florez, Far-infrared spectroscopy of minibands and confined donors in GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As superlattices, *Physical Review B* **43** (17), 13983-13991 (1991).
99. D. C. Reynolds, K. R. Evans, C. E. Stutz, K. K. Bajaj, and P. W. Yu, Photoluminescence determination of the binding energy of residual donors in 300-Å GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells, *Physical Review B* **44** (16), 8869-8872 (1991).
100. J-P. Cheng and B. D. McCombe, Confinement effects on the low-field-high-field correspondences of hydrogenic impurity states in quasi-two-dimensional systems, *Physical Review B* **42** (12), 7626-7629 (1990).
101. A. A. Reeder, B. D. McCombe, F. A. Chambers, and G. P. Devane, Far-infrared study of confinement effects on acceptors in GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells, *Physical Review B* **38** (6), 4318-4321 (1988).
102. P. O. Holtz, Q. X. Zhao, A. C. Ferreira, B. Monemar, M. Sundaram, J. L. Merz,

- and A. C. Gossard, Excited states of shallow acceptors confined in GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells, *Physical Review B* **48** (12), 8872-8877 (1993).
103. P. O. Holtz, Q. X. Zhao, B. Monemar, M. Sundaram, J. L. Merz, and A. C. Gossard, Electronic structure of a shallow acceptor confined in a GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum well, *Physical Review B* **47** (12), 15675-15678 (1993).
  104. J. López-Gondar, J. d'Albuquerque e Castro, and Luiz E. Oliveira, Electric-field effects on shallow impurity states in GaAs-(Ga,Al)As quantum wells, *Physical Review B* **42** (11), 7069-7077 (1990).
  105. R. C. Miller, A. C. Gossard, W. T. Tsang, and O. Munteanu, Bound excitons in *p*-doped GaAs quantum wells, *Solid State Communications* **43** (7), 519-522 (1982).
  106. P. O. Holtz, M. Sundaram, K. Doughty, J. L. Merz, and A. C. Gossard, Spectroscopic study of the effect of confinement on shallow acceptor states in GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells, *Physical Review B* **40** (18), 12338-12345 (1989).
  107. D. C. Reynolds, C. E. Leak, K. K. Bajaj, C. E. Stutz, R. L. Jones, K. R. Evans, P. W. Yu, and W. M. Theis, Determination of the binding energy of excitons to neutral donors located at the center or edge of the well or at the center of barrier in Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs multiple-quantum-well structures, *Physical Review B* **40** (9), 6210-6217 (1989).
  108. J. L. Dunn, C. A. Bates, M. J. Pye, D. Boffety, A.-M. Vasson, A. Vasson, and J. Leymarie, Binding energy of bound excitons *D*<sup>0</sup>*X* in quantum wells, *Physical Review B* **58** (12), 7970-7977 (1998).
  109. W. Bludau and E. Wagner, Impact ionisation of excitons in GaAs, *Physical Review B* **13** (12), 5410-5414 (1976).
  110. J. R. Haynes, Experimental Proof of the Existence of a New Electronic Complex in Silicon, *Physical Review Letters* **4** (7), 361-363 (1960).
  111. A. Dargys and J. Kundrotas, *HANDBOOK on PHYSICAL PROPERTIES of Ge, Si, GaAs and InP* (Science and Encyclopedia Publishers, Vilnius, 1994).
  112. D. A. Kleinman, Binding energy of biexcitons and bound excitons in quantum wells, *Physical Review B* **28** (2), 871-879 (1983).
  113. G. Kioseoglou, H. D. Cheong, H. A. Nickel, A. Petrou, B. D. McCombe, and W. Schaff, Photoluminescence and reflectance studies of negatively charged excitons in GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As quantum-well structures, *Physical Review B* **61** (7), 4780-4785 (2000).
  114. F. H. Stillinger, Axiomatic Basis for Spaces with Noninteger Dimension, *Journal of Mathematical Physics* **18** (6), 1224-1234 (1977).
  115. P. Lefebvre, P. Christol, and H. Mathieu, Universal formulation of excitonic linear absorption spectra in all semiconductor microstructures, *Superlattices and Microstructures* **17** (1), 19-21 (1995).
  116. M. Shinada and S. Sugano, Interband Optical Transitions in Extremely Anisotropic Semiconductors. I. Bound and Unbound Exciton Absorption, *Journal of the Physical Society of Japan* **21** (10), 1936-1946 (1966).
  117. R. J. Elliott, Intensity of Optical Absorption by Excitons, *Physical Review* **108** (6), 1384-1389 (1957).
  118. H. Haug and S. W. Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors* (World Scientific, Singapore, 1990).
  119. E. Reyes-Gómez, A. Matos-Abiague, C. A. Perdomo-Leiva, M. de Dios-Leyva,

- and L. E. Oliveira, Excitons and shallow impurities in GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As semiconductor heterostructures within a fractional-dimensional space approach: Magnetic-field effects, *Physical Review B* **61** (19), 13104-13114 (2000).
120. D. D. Sell, Resolved Free-Exciton Transitions in the Optical-Absorption Spectrum of GaAs, *Physical Review B* **6** (10), 3750-3753 (1972).
  121. D. M. Eagles, Optical absorption and recombination radiation in semiconductors due to transitions between hydrogen-like acceptor impurity levels and the conduction band, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **16** (1-2), 76-83 (1960).
  122. W. P. Dumke, Optical Transitions Involving Impurities in Semiconductors, *Physical Review* **132** (5), 1998-2002 (1963).
  123. E. J. Johnson, iš: *Semiconductors and Semimetals: Optical Properties of III-V Compounds*, Vol. 3, ed. R. K. Willardson and A. C. Beer (Academic Press, New York, 1967) pp. 153-258.
  124. Guo-qiang Hai, F. M. Peeters, and J. T. Devreese, Polaron energy and effective mass in a quantum well, *Physical Review B* **42** (17), 11063-11072 (1990).
  125. A. Matos-Abiague, Polaron effect in GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum wells: A fractional-dimensional space approach, *Physical Review B* **65** (16), 165321(9) (2002).
  126. I. Brener, M. Olszakier, E. Cohen, E. Ehrenfreund, Arza Ron, and L. Pfeiffer, Particle localization and phonon sidebands in GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As multiple quantum wells, *Physical Review B* **46** (12), 7927-7930 (1992).
  127. B. Jusserand, D. Paquet, and A. Regreny, "Folded" optical phonons in GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As superlattices, *Physical Review B* **30** (10), 6245-6247 (1984).
  128. A. K. Sood, J. Menéndez, M. Cardona, and K. Ploog, Resonance Raman Scattering by Confined LO and TO Phonons in GaAs-AlAs Superlattices, *Physical Review Letter* **54** (19), 2111-2114 (1985).
  129. A. K. Sood, J. Menéndez, M. Cardona, and K. Ploog, Interface Vibrational Modes in GaAs-AlAs Superlattices, *Physical Review Letter* **54** (19), 2115-2118 (1985).
  130. A. K. Arora, A. K. Ramdas, M. R. Melloch and N. Otsuka, Interface vibrational Raman lines in GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As superlattices, *Physical Review B* **36** (2), 1021-1024 (1987).
  131. D. C. Reynolds, D. N. Talwar, M. O. Manasreh, and C. E. Stutz, Phonon coupling associated with free-to-bound and bound-to-bound transitions in GaAs layers grown by molecular-beam epitaxy, *Physical Review B* **47** (20), 13304-13308 (1993).
  132. A. Mooradian, G. B. Wright, First order Raman effect in III-V compounds, *Solid State Communications* **4** (9), 431-434 (1966).
  133. O. K. Kim and W. G. Spitzer, Infrared reflectivity spectra and Raman spectra of Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As mixed crystals, *Journal of Applied Physics* **50** (6), 4362-4370 (1979).
  134. R. C. Newman, iš: *Semiconductors and Semimetals: Imperfections in III/V Materials*, Vol. 38, ed. Eicke R. Weber (Academic Press, Boston, 1993) pp. 117-187.
  135. K. W. Sun, H. Y. Chang, C. M. Wang, T. S. Song, S. Y. Wang, C. P. Lee, Raman and hot electron-neutral acceptor luminescence studies of electron-optical phonon interactions in GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells, *Solid State*

- Communications* **115** (10), 563-567 (2000).
136. Q. Huang and R. G. Ulbrich, Impurity-induced resonance Raman scattering at the ( $e, A^0$ ) threshold in lightly carbon-doped  $p$ -type GaAs at 2 K, *Journal of Luminescence* **99** (1), 19-28 (2002).
  137. M. Soltani, M. Certier, R. Evrard, and E. Kartheuser, Photoluminescence of CdTe doped with arsenic and antimony acceptors, *Journal of Applied Physics* **78** (9), 5626-5632 (1995).
  138. Kun Huang and Avril Rhys, Theory of Light Absorption and Non-Radiative Transitions in F-Centres, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A* **204** (1078), 406-423 (1950).
  139. D. J. Mowbray, O. P. Kowalski, M. S. Skolnick, M. Hopkinson, J. P. R. David, Optical spectroscopy of AlGaInP based wide band gap quantum wells, *Superlattices and Microstructures* **15** (3), 313-316 (1994).
  140. A. L. Gurskii, S. V. Voitikov, Quantum defect approach for the effect of electron-phonon coupling on impurity recombination in semiconductors, *Solid State Communications* **112** (6), 339-343 (1999).
  141. H. L. Malm and R. R. Haering, Franck-Condon Effects in the Luminescence of CdS, *Canadian Journal of Physics* **49** (23), 2970-2988 (1971).
  142. M. Carras, V. Berger, X. Marcadet, and B. Vinter, Experimental evidence of a Mott transition in highly doped two-dimensional confined structures, *Physical Review B* **70** (23), 233310(3) (2004).
  143. J. Serre, A. Ghazali, and A. Gold, Impurity levels, impurity bands, excited impurity bands, and band tails: The electronic density of states in quantum wells and heterostructures, *Physical Review B* **39** (12), 8499-8510 (1989).
  144. S. Modesti, R. Duca, P. Finetti, G. Ceballos, M. Piccin, S. Rubini, and A. Franciosi, Microscopic Mechanisms of Self-Compensation in Si  $\delta$ -Doped GaAs, *Physical Review Letters* **92** (8), 086104(4) (2004).
  145. L. Pavesi, Nguyen Hong Ky, J. D. Ganière, F. K. Reinhart, N. Baba-Ali, I. Harrison, B. Tuck, and M. Henini, Role of point defects in the silicon diffusion in GaAs and Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As and in the related superlattice disordering, *Journal of Applied Physics* **71** (5), 2225-2237 (1992).
  146. I. Harrison, L. Pavesi, M. Henini, and D. Johnston, Annealing effects on Si-doped GaAs grown on high-index planes by molecular-beam epitaxy, *Journal of Applied Physics* **75** (6), 3151-3157 (1994).
  147. M. Mihara, M. Mannoh, K. Shinozaki, S. Naritsuka, and M. Ishii, Photoluminescence of the 78 meV Acceptor in GaAs Layers Grown by Molecular Beam Epitaxy, *Japanese Journal of Applied Physics* **25** (Part 2, No. 7), L611-L613 (1986).
  148. J. Kavaliauskas, G. Krivaitė, B. Čechavičius, G. Valušis, D. Seliuta, B. Sherliker, M. Halsall, P. Harrison, E. Linfield, and M. Steer, Differential surface photovoltage spectroscopy of  $\delta$ -doped GaAs/AlAs multiple quantum wells below and close to Mott transition, *physica status solidi (b)* **245** (1), 82-88 (2008).
  149. D. Seliuta, J. Kavaliauskas, B. Čechavičius, S. Balakauskas, G. Valušis, B. Sherliker, M. P. Halsall, P. Harrison, M. Lachab, S. P. Khanna, and E. H. Linfield, Impurity bound-to-unbound terahertz sensors based on beryllium and silicon  $\delta$ -doped GaAs/AlAs multiple quantum wells, *Applied Physics Letters* **92** (5), 053503(3) (2008).
  150. N. F. Mott, *Metal-insulator Transitions* (Taylor & Francis, London, 1974).

151. P. Nithiananthi and K. Jayakumar, Semiconductor–Metal transition in a quantum well, *Physica B: Condensed Matter* **391** (1), 113-117 (2007).
152. C. I. Harris, B. Monemar, H. Kalt, and K. Köhler, Doping-density dependence of photoluminescence in highly Si-doped GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells from below to above the metallic limit, *Physical Review B* **48** (7), 4687-4694 (1993).
153. P. O. Holtz, A. C. Ferreira, B. E. Sernelius, A. Buyanov, B. Monemar, O. Mauritz, U. Ekenberg, M. Sundaram, K. Campman, J. L. Merz, and A. C. Gossard, Many-body effects in highly acceptor-doped GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells, *Physical Review B* **58** (8), 4624-4628 (1998).
154. J. Kortus and J. Monecke, Formation of subbands in  $\delta$ -doped semiconductors, *Physical Review B* **49** (24), 17216-17223 (1994).
155. G. Tränkle, H. Leier, A. Forchel, H. Haug, C. Ell, and G. Weimann, Dimensionality dependence of the band-gap renormalization in two- and three-dimensional electron-hole plasmas in GaAs, *Physical Review Letters* **58** (4), 419-422 (1987).
156. Rupert Huber, Robert A. Kaindl, Ben A. Schmid, and Daniel S. Chemla, Broadband terahertz study of excitonic resonances in the high-density regime in GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells, *Physical Review B* **72** (16), 161314(4) (2005).
157. S. Wongmanerod, B. E. Sernelius, P. O. Holtz, B. Monemar, O. Mauritz, K. Reginski, and M. Bugajski, Many-body effects in highly *p*-type modulation-doped GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells, *Physical Review B* **61** (4), 2794-2798 (2000).
158. I-H. Tan, G. L. Snider, L. D. Chang, and E. L. Hu, A self-consistent solution of Schrödinger–Poisson equations using a nonuniform mesh, *Journal of Applied Physics* **68** (8), 4071-4076 (1990).
159. P. Harrison, *Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures* (Wiley, Chichester, 2004).
160. Marcos H. Degani, Electron energy levels in a  $\delta$ -doped layer in GaAs, *Physical Review B* **44** (11), 5580-5584 (1991).
161. G. M. Sipahi, R. Enderlein, L. M. R. Scolfaro, and J. R. Leite, Band structure of holes in *p*-type  $\delta$ -doping quantum wells and superlattices, *Physical Review B* **53** (15), 9930-9942 (1996).
162. Q. X. Zhao, M. Willander, P. O. Holtz, W. Lu, H. F. Dou, S. C. Shen, G. Li, and C. Jagadish, Radiative recombination in *p*-type  $\delta$ -doped layers in GaAs, *Physical Review B* **60** (4), R2193-R2196 (1999).
163. Q. X. Zhao, M. Willander, J. P. Bergman, P. O. Holtz, W. Lu, and S. C. Shen, Dynamic properties of radiative recombination in *p*-type  $\delta$ -doped layers in GaAs, *Physical Review B* **63** (12), 125337(5) (2001).
164. M. S. Skolnick, J. M. Rorison, K. J. Nash, D. J. Mowbray, P. R. Tapster, S. J. Bass, and A. D. Pitt, Observation of a Many-Body Edge Singularity in Quantum-Well Luminescence Spectra, *Physical Review Letters* **58** (20), 2130-2133 (1987).
165. J. Wagner, A. Ruiz, and K. Ploog, Fermi-edge singularity and band-filling effects in the luminescence spectrum of Be- $\delta$ -doped GaAs, *Physical Review B* **43** (14), 12134-12137 (1991).
166. D. Richards, J. Wagner, H. Schneider, G. Hendorfer, M. Maier, A. Fischer, and K. Ploog, Two-dimensional hole gas and Fermi-edge singularity in Be  $\delta$ -doped GaAs, *Physical Review B* **47** (15), 9629-9640 (1993).

## AUTORIAUS MOKSLO PUBLIKACIJOS DISERTACIJOS TEMA

*Leidiniuose, įtrauktuose į Mokslinės informacijos instituto (ISI) duomenų  
bazes*

- S1) A. J. Kundrotas, A. Čerškus, S. Ašmontas, G. Valušis, B. Sherliker, M. P. Halsall, P. Harrison, M. J. Steer, Experimental study of optical transitions in Be-doped GaAs/AlAs multiple quantum wells, *Acta Physica Polonica A* **107** (2), 245-249 (2005).
- S2) A. J. Kundrotas, A. Čerškus, S. Ašmontas, G. Valušis, B. Sherliker, M. P. Halsall, M. J. Steer, E. Johannessen, P. Harrison, Excitonic and impurity-related optical transitions in Be  $\delta$ -doped GaAs/AlAs multiple quantum wells: Fractional-dimensional space approach, *Physical Review B, Condensed matter and materials physics* **72** (23), 235322-1-11 (2005).
- S3) A. J. Kundrotas, A. Čerškus, A. Johannessen, S. Ašmontas, G. Valušis, M. P. Halsall, P. Harrison, Phonon sidebands in photoluminescence of beryllium  $\delta$ -doped GaAs/AlAs multiple quantum wells, *Proceedings of SPIE* **6596**, 659612-1-7 (2007).
- S4) A. Čerškus, A. J. Kundrotas, G. Valušis, P. Harrison, S. Khanna, E. Linfield, Formation of low energy tail in silicon  $\delta$ -doped GaAs/AlAs multiple quantum wells, *Proceedings of SPIE* **6596**, 659613-1-6 (2007).
- S5) A. J. Kundrotas, A. Čerškus, S. Ašmontas, G. Valušis, M. P. Halsall, E. Johannessen, P. Harrison, Impurity-induced Huang-Rhys factor in beryllium  $\delta$ -doped GaAs/AlAs multiple quantum wells: fractional-dimensional space approach, *Semiconductor Science and Technology* **22** (9), 1070-1076 (2007).
- S6) A. J. Kundrotas, A. Čerškus, G. Valušis, M. Lachab, S. P. Khanna, P. Harrison, E. H. Linfield, Radiative recombination spectra of heavily  $p$ -type  $\delta$ -doped GaAs/AlAs MQWs, *Acta Physica Polonica A* **113** (3), 963-966 (2008).
- S7) A. J. Kundrotas, A. Čerškus, G. Valušis, M. Lachab, S. P. Khanna, P. Harrison, E. H. Linfield, Radiative recombination spectra of  $p$ -type  $\delta$ -doped GaAs/AlAs multiple quantum wells near the Mott transition, *Journal of Applied Physics* **103** (12), 123108-1-6 (2008).

*Lietuvos mokslo tarybos patvirtinto sąrašo tarptautinėse duomenų bazėse  
referuojamuose leidiniuose*

- S8) A. J. Kundrotas, A. Čerškus, S. Ašmontas, A. Johannessen, G. Valušis, B. Sherliker, M. P. Halsall, P. Harrison, M. J. Steer, Behaviour of optical transitions in GaAs/AlAs with highly Be  $\delta$ -doped MQWs, *Lithuanian Journal of Physics* **45** (3), 201-206 (2005).

### **Neįtrauktos į disertaciją**

*Leidiniuose, įtrauktuose į Mokslinės informacijos instituto (ISI) duomenų bazes*

- S9) S. Ašmontas, A. Čerškus, J. Gradauskas, A. J. Kundrotas, A. Lučun,



- V. Petkun, A. Sužiedėlis, A. Šilėnas, High power microwave detection in asymmetrically shaped  $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  structures, *Acta Physica Polonica A* **107** (2), 315-318 (2005).
- S10) A. Kozič, A. Sužiedėlis, V. Petkun, A. Čerškus, H. Shtrikmann, J. Gradauskas, A. J. Kundrotas, S. Ašmontas, Properties of constricted 2DEG/metal structures in microwave electric fields, *Optica applicata* **35** (3), 465-470 (2005).
- S11) A. Sužiedėlis, V. Petkun, A. Kozič, V. Kazlauskaitė, A. Čerškus, G. J. Steikūnas, J. Gradauskas, A. J. Kundrotas, S. Ašmontas, I. Papsujeva, A. Narkūnas, T. Anbineris, V. Umansky, H. Shtrikman, GaAs/AlGaAs structures with  $\delta$ -doped layer for microwave detection, *Proceedings of SPIE* **6596**, 65960N-1-6 (2007).
- S12) V. Kazlauskaitė, A. Sužiedėlis, A. Čerškus, J. Gradauskas, S. Ašmontas, J. Kundrotas, Enhancement of excitonic photoluminescence in silicon doped  $n^+/i\text{-GaAs}$  structures, *Lithuanian Journal of Physics* **49** (3), (2009) (*Priimtas*).

*Lietuvos mokslo tarybos patvirtinto sąrašo tarptautinėse duomenų bazėse  
referuojamuose leidiniuose*

- S13) A. Kozič, V. Petkun, A. Čerškus, H. Shtrikmann, V. Umansky, J. Gradauskas, D. Seliuta, A. Sužiedėlis, A. J. Kundrotas, S. Ašmontas, Influence of spacer on microwave detection in modulation-doped GaAs structures, *Lithuanian Journal of Physics* **46** (3), 325-329 (2006).

### Konferencijų tezės

- T1) A. J. Kundrotas, A. Čerškus, S. Ašmontas, G. Valušis, B. Sherliker, M. P. Halsall, P. Harrison, M. J. Steer, Experimental study of optical transitions in Be-doped GaAs/AlAs multiple quantum wells, iš: *12th international symposium on ultrafast phenomena in semiconductors, August 22-25, 2004, Vilnius, Lithuania*, p. 47.
- T2) A. J. Kundrotas, A. Čerškus, S. Ašmontas, G. Valušis, B. Sherliker, M. P. Halsall, P. Harrison, M. J. Steer, Optinių šuolių ypatumai Be  $\delta$ -legiruotuose GaAs/AlAs kartotiniuose kvantiniuose šuliniuose, iš: *36-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, 2005 m. birželio 16-18 d. Vilnius*, p. 143.
- T3) A. Čerškus, A. J. Kundrotas, G. Valušis, P. Harrison, S. Khanna, E. Linfield, Formation of low energy tail in silicon  $\delta$ -doped GaAs/AlAs multiple quantum wells, iš: *Advanced optical materials and devices (AOMD-5): 5th international conference, 27-30 August, 2006, Vilnius, Lithuania*, p. 37.
- T4) A. J. Kundrotas, A. Čerškus, A. Johannessen, S. Ašmontas, G. Valušis, M. P. Halsall, P. Harrison, Phonon sidebands in photoluminescence of beryllium  $\delta$ -doped GaAs/AlAs multiple quantum wells, iš: *Advanced optical materials and devices (AOMD-5): 5th international conference, 27-30 August, 2006, Vilnius, Lithuania*, p. 36.
- T5) M. Lachab, S. P. Khanna, P. Harrison, E. H. Linfield, A. G. Davies, A. Čerškus, A. J. Kundrotas, D. Seliuta, G. Valušis, Optical and transport properties of symmetric  $\delta$ -doped GaAs/AlAs multiple quantum wells grown by MBE for terahertz applications, iš: *13th International conference on modulated semiconductor structures (MSS-13), July 15-20 2007, Genova, Magazzini del*

*Cotone, Italy*, p. TU-PM48.

- T6) A. J. Kundrotas, A. Čerškus, G. Valušis, M. Lachab, S. P. Khanna, P. Harrison, E. H. Linfield, Radiative recombination spectra of heavily  $p$ -type  $\delta$ -doped GaAs/AlAs MQWs, iš: *13th International symposium on ultrafast phenomena in semiconductors, 26-29 August, 2007 Vilnius, Lithuania*, p. 32.

### Neįtrauktos į disertaciją

- T7) A. Kozič, V. Petkun, A. Čerškus, H. Shtrikman, V. Umansky, J. Gradauskas, D. Seliuta, A. Sužiedėlis, A. J. Kundrotas, S. Ašmontas, Moduluotai legiruotų GaAs darinių skiriamąjį sluoksnio įtaka mikrobangų detekcijai, iš: *36-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, 2005 m. birželio 16-18 d. Vilnius*, p. 154.
- T8) A. Kozič, A. Sužiedėlis, V. Petkun, A. Čerškus, H. Shtrikmann, J. Gradauskas, A. J. Kundrotas, S. Ašmontas, Properties of constricted 2DEG/Metal structures in microwave electric fields, iš: *X Seminarium powierzchnia i struktury cienkwarstwowe, 17-21 maja 2005, Wrocław*, p. [1].
- T9) V. Petkun, A. Kozič, V. Kazlauskaitė, A. Čerškus, G. J. Steikūnas, A. Sužiedėlis, J. Gradauskas, A. J. Kundrotas, S. Ašmontas, A. Narkūnas, I. Papsujeva, T. Anbinderis, V. Umansky, GaAs/AlGaAs structures with  $\delta$ -doped layer for microwave detection, iš: *Advanced optical materials and devices (AOMD-5): 5th international conference, 27-30 August, 2006, Vilnius, Lithuania*, p. 51.
- T10) M. Vingelis, S. Ašmontas, A. Sužiedėlis, E. Širmulis, J. Gradauskas, V. Kazlauskaitė, A. J. Kundrotas, A. Čerškus, Electron heating phenomena under infrared radiation in thin GaAs layers, iš: *Radiation interaction with material and its use in technologies 2008: international conference, Kaunas, Lithuania, 24-27 September, 2008: program and materials. [2008] (2008)*, p. 265-266.
- T11) V. Kazlauskaitė, A. Sužiedėlis, A. Čerškus, J. Gradauskas, S. Ašmontas, A. J. Kundrotas, Eksitoninės fotoluminescencijos stiprinimas siliciu legiruotuose  $n^+/i$ -GaAs dariniuose, in: *38-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija: programa ir pranešimų tezės: Vilnius, 2009 m. birželio 8-10 d. Vilnius*, p. 43.